

C. Filohais

Frankfort. M 1982

KOLLEKTIVE MASSE UND NULLPUNKTSENERGIEN IN DER
GENERATORCKOORDINATENMETHODE

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main



von

Carlos Fiolhais
aus Lissabon

Frankfurt am Main

1982

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereich Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

Dekan:	Prof. Dr. W. Jung
Leiter der Arbeit:	Prof. Dr. R. Dreizler
Erstgutachter:	Prof. Dr. R. Dreizler
Zweitgutachter:	Prof. Dr. J. Maruhn

Tag der mündlichen Prüfung: 20. 12. 1982



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550809_0024

Diese Arbeit wurde von der Gulbenkian-Stiftung, Lissabon,
gefördert.

Inhaltsverzeichnis

I . Einleitung und Überblick	4
II. Die Generatorkoordinatenmethode (GCM)	6
II.1. Historische Perspektive	6
II.2. Kollektive GCM-Schrödingergleichung auf der Basis der Gaußschen Überlappnäherung (GOA)	9
II.3. Beziehungen zu anderen kollektiven Methoden	18
II.3.1. Adiabatische zeitabhängige Hartree-Fock(ATDHF) Theorie	18
II.3.2. Kurbelmodell	23
II.3.3. Pfadintegralmethode (PIM)	25
III. Der GCM-Massenparameter	29
III.1. Die GCM-Massenformel	29
III.2. Vergleich mit der Kurbelmasse	31
III.3. Vergleich mit der ATDHF-Masse und ihren Näherungen	33
III.3.1. Komplette ATDHF-Theorie.	33
III.3.2. HF mit Zwangsbedingung (CHF)	37
IV. Die GCM-Nullpunktsenergien (ZPE)	47
V. Anwendungen	50
V.1. Kollektive Bewegungen, die einer Symmetrie entsprechen	50
V.2. Schwingungen. Untersuchung an einfachen Modellen	55
V.2.1. Anisotroper harmonischer Oszillator	55
V.2.2. Lipkin-Modell	56
V.2.3. Quadrupol-Quadrupol-Modell	64
VI. Modellberechnung der GCM-Masse und ZPE für Spaltung	67
VI.1. Vorstellung des Modells	67
VI.2. Berechnung der Masse	73
VI.3. Berechnung der ZPE	84
VI.4. Berechnung der Spaltdynamik	86
VII. Zusammenfassung und Ausblick	93

VIII. Anhang	96
VIII.1.	96
VIII.2.	97
VIII.3.	98
IX. Liste der verwendeten Abkürzungen	100
X. Literaturverzeichnis	101

I. Einleitung und Überblick

Eine konsistente mikroskopische Beschreibung eines quantenmechanischen Vielteilchensystems ist eines der Ziele der theoretischen Physik. Obwohl beträchtliche Fortschritte im Verständnis der Grundlagen und Mechanismen der kollektiven Bewegungen ein solches Systems gemacht wurden, bleiben noch einige Frage offen.

Der Atomkern ist besonders geeignet, die Beziehung zwischen unabhängiger Teilchenbewegung und kollektiven Aspekten zu untersuchen. Kerne sind klein genug, um unabhängige Teilcheneigenschaften aufzuzeigen und groß genug, um kollektive Bewegungen aufrechtzuerhalten. Historisch gesehen sind dementsprechend zwei Entwicklungen bei der Diskussion von Kerneigenschaften zu unterscheiden : das Tröpfchenmodell und das Schalenmodell [BM69,BM75] . Die Formulierung des Schalenmodells folgte erst einige Jahre nach der Veröffentlichung des Tröpfchenmodells. Diese zwei Kernmodelle mögen auf den ersten Blick unvereinbar sein. So sind Anstrengungen unternommen worden, ein einheitliches Bild zu schaffen.

Die Generatorkoordinatenmethode (Generator Coordinate Methode, GCM) ist eine Variationsmethode, die besonders für die Untersuchung kollektiver Phänomene entwickelt wurde [HW53,GH57] .

Der GCM-Ansatz für einen Eigenzustand eines Vielteilchensystems ist

$$|\psi\rangle = \int dq |\phi(q)\rangle f(q) \quad , \quad (1.1)$$

wobei die Generatorkoordinaten q (es kann beliebig viele geben, sowohl reell als auch komplex) geeignete Parameter zur Beschreibung des zu betrachtenden physikalischen Systems sind. Die Vektoren $|\phi(q)\rangle$ entsprechen koordinatenabhängigen Zuständen, die erzeugende Zustände genannt werden. $f(q)$ ist die Gewichtsfunktion.

In der Kernphysik beschreibt q im allgemeinen eine kollektive Verschiebung (e.g. Translationen, Rotationen , Deformationen) und die $\{|\phi(q)\rangle\}$ sind unabhängige Teilchen-

oder Quasiteilchenwellenfunktionen für das Vielnukleonensystem, die einem q -abhängigen mittleren Feld entsprechen. Das System wird durch eine gewichtete "Summe" über alle Werte der Generatorkoordinaten dargestellt, i.e. die kollektive Bewegung wird als eine lineare Überlagerung von Einteilchenbewegungen in verschiedenen mittleren Feldkonfigurationen beschrieben. Auf diese Weise liefert die GCM ein physikalisch sinnvolles Bild der Verknüpfung zwischen Einteilchen- und kollektiven Aspekten.

Die Gewichtsfunktion wird durch ein Variationsverfahren bestimmt. Führt man den GCM-Ansatz (1.1) in das stationäre Variationsprinzip ein

$$\delta_f \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0 \quad , \quad (1.2)$$

erhält man die sogenannte Griffin-Hill-Wheeler-Gleichung (GHW-Gl.)

$$\int dq' (\langle \phi(q) | H | \phi(q') \rangle - E \langle \phi(q) | \phi(q') \rangle) f(q') = 0 \quad . \quad (1.3)$$

Die Lösung der GHW-Gl. entspricht der Diagonalisierung des Hamiltonoperators in dem von den $|\phi(q)\rangle$ aufgespannten Hilbertraum (siehe spätere Diskussion in Abschnitt II.2). Die Qualität der Lösung hängt selbstverständlich von der Auswahl der erzeugenden Zustände ab, wobei die physikalische Intuition eine wesentliche Rolle spielt. Man kann sogar versuchen, die erzeugenden Zustände zu optimieren, indem man eine Variation in Bezug auf die Zustände neben der Variation in Bezug auf die Gewichtsfunktion durchführt. Im diesem Fall ist es aber nicht gewährleistet, daß der Produktcharakter der erzeugenden Zustände erhalten bleibt.

Der vollständige Vorteil der GCM-Formulierung kann für Systeme mit einer großen Teilchenzahl nicht genutzt werden. Man muß sich auf Näherungsverfahren beschränken, um Vielnukleonensysteme, die für das Studium von Kohärenzeffekten von besonderem Interesse sind, zu berücksichtigen. Der übliche Zugang, der in dieser Situation verwendet wird, ist die sogenannte Gaußsche Überlappnäherung (Gaussian overlap approximation, GOA). Diese erlaubt die Transformation der GHW-Gl. (1.3) in eine Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Form einer Schrödinger-Gl.

(ähnlich dem quantisierten Bohrschen Hamiltonoperator, der für das Drehungs- und Schwingungsproblem entwickelt wurde). Terme dieser S-Gl. kann man als ein kollektives Potential, das Nullpunktsenergien (Zero-Point Energies, ZPE) einschließt, bzw. als kollektiver Massenparameter identifizieren. Die ganze Näherungsmethode stützt sich auf die Voraussetzung, daß die wichtigste dynamische Information über das Vielnukleonensystem in der kollektiven S-Gl. enthalten ist.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Untersuchung der kollektiven Massenparameter und der ZPE im Rahmen der GCM, unter besonderer Berücksichtigung des Spaltprozesses.

Unsere Kenntnisse der dynamischen Aspekte des Spaltprozesses wurde mit der relativ zuverlässigen Berechnung von Potentialbarrieren nach der Strutinsky-Methode wesentlich erweitert [BDJ72, Ni72, Br80]. Im Gegensatz dazu fehlt jedoch noch ein entsprechendes Verständnis des Massenparameters. Das Kurbelmodell oder Cranking-Modell ist bisher die einzige mikroskopische Methode, die zur Beschreibung von Massenparametern in Spaltprozessen benutzt wurde [BDJ72, So79]. Eine Reihe von Diskrepanzen, die in dieser Näherung auftreten, werden in der Literatur diskutiert [Ro70, MN78, DDR80].

Unter den mikroskopischen Theorien, die kollektive Phänomene beschreiben, ist die adiabatische zeitabhängige Hartree-Fock- (Adiabatic time-dependent Hartree-Fock, ATDHF) Theorie [Vi77, BV79, GR80] die in den letzten Jahren am meisten diskutierte Methode. Es gibt Hinweise darauf, daß diese Theorie eine geeignete Beschreibung kollektiver Massen liefert. Die korrekte kollektive Masse für Translationen wird auf der Basis der Galileischen Invarianz erhalten. Die experimentell niedrig liegenden Zustände der Rotationsbanden scheinen gut reproduziert zu werden, wenn kurzreichweitige Korrelationen einbezogen werden. Die Situation ist komplizierter für Schwingungs- und Spaltprozesse, da die Berechnung von selbstkonsistenten Trägheitsparametern größeren Aufwand erfordert. Die experimentelle Information für diesen Fall ist zusätzlich nur indirekt: die kollektiven Frequenzen und Lebensdauern hängen sowohl von dem Potential als auch von der Masse ab. Üblicherweise beschränkt man die Diskussion auf

Massenparameter, die man aus Iterationen in niedrigen Ordnungen [Vi77] erhält, bzw. zusätzlich durch die Inglisschen Cranking-Formel annähert.

Ein Teil dieser Arbeit befaßt sich damit einen Zusammenhang zwischen der GCM-Masse und der ATDHF-Masse (bzw. deren Cranking-Näherung) zu finden. Es ist bekannt, daß für die sogenannten kohärenten Zustände die Identität zwischen den beiden Massenformeln gilt [ABC77b, RG79, GR80]. Da aber diese Zustände nicht die übliche Basis in der ATDHF-Diskussion bilden, wird hier der Unterschied für Slaterdeterminanten untersucht.

In Kapitel II wird die GCM vorgestellt und die kollektive S-Gl. unter der Annahme der GOA hergeleitet. Der allgemeine Zusammenhang mit anderen kollektiven Theorien wird diskutiert (ATDHF-Theorie, Cranking-Modell, Pfadintegralmethode).

Ein ausführlicher Vergleich der Trägheitsparameter in der GCM und ATDHF-Methode wird in Kapitel III durchgeführt. Zuerst wird die Struktur der GCM-Massenformel betrachtet und mit der Cranking-Formel verglichen. Das Ergebnis des Vergleiches besteht darin, daß der Einteilchengrenzfall der GCM-Masse nicht über den Cranking-Wert hinausgehen kann. Die allgemeinen Ausdrücke für die ATDHF- und GCM-Massen können nur für den Minimalpunkt der Potentialenergiefläche verglichen werden. In diesem Punkt überschreitet die GCM-Masse den ATDHF-Wert nicht in Übereinstimmung mit dem Resultat des Einteilchenbildes. Eine obere Grenze für den Unterschied zwischen den zwei Massen kann angegeben werden. Für die minimale Potentialenergie kann man weiterhin Beziehungen zwischen den praktikablen Trägheitsparametern finden, die aus der GCM und der ATDHF-Methode resultieren.

In Kapitel IV werden die kinetische und potentielle ZPE untersucht, die in der GCM-Formulierung auftreten. Berechnet man die kinetische ZPE entweder mit der GCM-Masse oder mit der ATDHF-Masse und vergleicht man sie mit der potentiellen ZPE, so stellt sich heraus, daß letztere nicht vernachlässigt werden darf.

In Kapitel V wird die praktische Anwendung des obigen Formalismus diskutiert. Der Unterschied zwischen einerseits kollektiven Bewegungen, die einer Symmetrie des Hamiltonoperators entsprechen, und andererseits anderen kollektiven Bewegungen wie e.g. Schwingungen und Spaltung wird diskutiert. Es werden

einfache Modelle untersucht, die geeignet sind, Schwingungen schematisch zu beschreiben.

In Kapitel VI wird eine numerische Berechnung des GCM-Massenparameters und der ZPE für den Spaltprozeß auf der Basis eines Zweizentrenschalenmodells (Two-Center Shell Modell, TCSM) mit einer Paarkraft in der Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) Näherung vorgestellt. Der Unterschied zwischen der Cranking-Masse und dem Einteilchengrenzfall der GCM-Masse wird untersucht. Der Einfluß der nach der Transformation in das Quasiteilchenbild übriggebliebenen Wechselwirkung auf die GCM-Masse wird diskutiert. Diese Restbeiträge scheinen nicht sehr wichtig für die betrachtete Situation zu sein; das Beispiel kann aber die Fähigkeit der GCM beweisen, Restkräfte auf eine einfache Weise einzuschließen. Die kinetische ZPE der GCM wird mit und ohne residuale Kräfte berechnet und mit der kinetischen ZPE im Falle des Cranking-Modells bzw. der potentiellen ZPE verglichen. Der Einfluß der verschiedenen kollektiven Massen auf die Barrierendurchlässigkeit wird diskutiert.

Im letzten Kapitel wird schließlich eine Zusammenfassung dieser Arbeit gegeben, und eventuelle Erweiterungen und noch offene Fragen werden herausgestellt. Drei mathematische Beweise findet man in dem Anhang ..

In der Arbeit verwenden wir $K=1$ mit Ausnahme vom Kapitel VI.

II. Die Generatorkoordinatenmethode

II.1 Historische Perspektive

Der GCM-Ansatz (1.1) wurde von Hill und Wheeler in Zusammenhang mit dem Studium des Spaltprozesses vorgeschlagen [HW53]. Die GHW-Gl.(1.3) wurde erstmals von Griffin und Wheeler veröffentlicht. [GH57]. Diese Ansätze wurden von Griffin auf die Beschreibung der Monopol- und Quadrupolschwingungen von O^{16} angewandt [Gr57].

Ungefähr zur selben Zeit haben Peierls und Yoccoz die GCM in Zusammenhang mit Symmetrieverletzungen diskutiert [PY57, Yo57]. Sie haben festgestellt, daß die GCM-Masse die korrekte Translationsmasse nicht wiedergibt. Dieses Problem führte zu Vorurteilen gegen die Anwendung der GCM. Die GCM als ein Variationsverfahren kann aber nur gute Ergebnisse liefern, falls der Variationsraum ausreichend ist. Bald fand man, daß man die exakte Masse für Translationen erhält, wenn man eine Überlagerung von Slaterdeterminanten anstelle von einzelnen Slaterdeterminanten als erzeugenden Zustände berücksichtigt. Dies entspricht der Variation nach der Projektionsmethode von Rouhaninejad und Yoccoz [RY66], die äquivalent zu einem zweifachen Variationsansatz im Rahmen der GCM ist [HY74, RG79]. Zum gleichen Ergebnis führt die frühere dynamische GCM von Peierls und Thouless [PT62], die zwei zueinander konjugierte Parameter benutzt und die in letzter Zeit von Goeke und Reinhard [GR80] wiederaufgenommen wurde. Im Hinblick auf die Tatsache, daß Slaterdeterminanten im allgemeinen geeignete Ansätze für die Darstellung eines Kernzustandes bilden, sollte die mit der GCM-Translationsmasse verknüpfte Schwierigkeit nicht überbetont werden.

Die GOA ist zum ersten Mal in der Arbeit von Griffin und Wheeler [GH57] benutzt worden. Sie zeigten, daß die GOA für den Fall von Slaterdeterminanten als erzeugende Funktionen eine geeignete Näherung für Systeme mit großer Teilchenzahl bietet. Es gibt bisher keinen allgemeinen mathematischen Beweis für die GOA in der Literatur. Ihre Gültigkeit kann daher nur durch direkte numerische Berechnung nachgeprüft werden (siehe die Arbeiten von Haff und Wilets [HW73, HW74] und Reinhard [Re76] für Quadrupolbewegung bzw. Spaltung). Für den Grenzfall kleiner kollektiver Schwingungen entspricht die GOA der Quasibosonennäherung. Die GOA wurde von Jancovici und Schiff [JS64] und später von Brink und Weiguny [BW78] benutzt, um die

Random Phasennäherung (Random Phase Approximation, RPA) im Rahmen der GCM abzuleiten.

Die Techniken, die bei diesen Arbeiten entwickelt wurden, deuten die Fähigkeit der GCM an, Bosonenentwicklungen für Vielteilchen-Hamiltonoperatoren zu liefern [PUF71]. Bosonenentwicklungen beschreiben Abweichungen von harmonischen kollektiven Schwingungen (Anharmonizitäten).

Der Gültigkeitsbereich der GOA reicht jedoch weit über die Beschreibung der harmonischen Bewegungen hinaus [FC72]. Die GOA ermöglicht eine Umformung der GHW-Integralgleichung in eine Differentialgleichung zweiter Ordnung. Einige Schwierigkeiten für den Schwingungs- und für den Spaltungsfall ergeben sich aus der Tatsache, daß im Gegensatz zu Symmetrioperationen $f(q)$ nicht als eine Wellenfunktion interpretiert werden darf. Versuche, $f(q)$ als eine Wellenfunktion zu berücksichtigen, wurden zwar formuliert (e.g. siehe [HW72, HW74, WTH75, BB73]); in der Praxis haben sie sich aber als ungeeignet erwiesen. Nachdem man die richtige kollektive Wellenfunktion gefunden hatte, wurde die GCM für kollektive Bewegungen mit großen Amplituden angewandt und ihre Beziehung zur ATDHF-Methode untersucht [Vi75, ABC77b, RG78, RG79, CD79, GR80, RR80, PS81].

Es soll erwähnt werden, daß in der letzten Zeit beträchtliche Fortschritte im mathematischen Verständnis der GCM-Formulierung gemacht wurden, wobei die Ursache einiger Schwierigkeiten in numerischen Anwendungen erklärt wurden (siehe Abschnitt II.2) und die Methode mathematisch fundiert wurde [La76, TPG77, TP78, GT78, CDT78, BD79, PT80, Sc82].

Die GCM in der Kernphysik ist in dem Übersichtsartikel [Wo75] und in dem Buch von Ring und Schuck [RS80] ausführlich diskutiert worden. Es seien noch die Konferenzberichte von Ljubljana [MR73] und Mol [BL75] erwähnt.

Die GCM wird zur Zeit intensiv benutzt, um theoretische Kenntnisse über ein breites Spektrum kernphysikalischer Probleme zu gewinnen. Es scheint also an dieser Stelle angebracht, die aktuellsten GCM-Arbeiten zu skizzieren. In der Forschung seit 1979 kann man folgende wichtigste Anwendungsgebiete erkennen:

1- Niedrig liegende kollektive Zustände

Die Beschreibung dieser Zustände ist durch Bosonenentwicklungen möglich. Die GCM kann ein vereinheitliches Bild verschiedener Techniken im Rahmen der Bosonenentwicklungen liefern [FPU79, Do81, Ho81, Übersichtsartikel] . Vor kurzem wurde auch die GCM benutzt, um eine Verbindung des phänomenologischen Bosonen-Hamiltonoperators des wechselwirkenden Bosonenmodells mit dem alten Modell von Bohr und Mottelson zu formulieren [GK80, AW82] .

2- Cluster-Struktur

Das Cluster-Modell für gebundene Zustände kann eine Reihe spektroskopischer Beobachtungen erklären. In der GCM wird die Geometrie der Cluster anschaulich durch Generatorkoordinaten dargestellt [DGT80, FH80, FH81, KM82] . Aktuelle Übersichte über Cluster-Theorien findet man in [WK79, SPT80] .

3- Kollektive Bewegungen mit großen Amplituden

Die GCM ist für die Beschreibung von Kernschwingungen mit großen Amplituden , Schwerionenstreuung, Spaltung und Fusion besonders geeignet [BS79, BC80, PT80, BW80, DGT80, LBH80, BMP81, UGR81, La81, GH81, FT81, BP82] . Kern-Kern-Potentiale können bestimmt werden [Fr81] . Die grundlegenden Ideen für Spaltungsanwendungen findet man in [RG80] .

4- Neue Phänomene in Kernmaterie

- Riesenresonanzen [Ba80, PT80, Br81, PS81, GT81] .
- Pionenkondensate [Ru81, CP81] .

II.2 Kollektive GCM-Schrödingergleichung auf der Basis der GOA

Der Einfachheit halber wird im folgenden nur eine reelle Generatorkoordinate q berücksichtigt.

Die erzeugenden Zustände der GCM besitzen im allgemeinen die folgenden Eigenschaften (wir benutzen die Notation $|q\rangle \equiv |\phi(q)\rangle$):

1) Nichtorthogonalität

$$\langle q|q'\rangle \neq \delta(q-q').$$

2) Übervollständigkeit.

Wegen der Nichtorthogonalität besitzt die GHW-Gl. nicht die Form eines hermiteschen Eigenwertproblems. Die Gl. läßt sich jedoch zumindest formal auf diese Form bringen.

Die GHW-Gl.(1.3) kann umgeschrieben werden in

$$(\mathcal{H} - E\mathcal{N})f = 0, \quad (2.1)$$

wobei $\mathcal{H}$ und $\mathcal{N}$ Integraloperatoren sind. Die Kerne der Integraloperatoren sind durch $\langle q|\mathcal{H}|q'\rangle$, bzw. $\langle q|q'\rangle$ gegeben. Da $\mathcal{N}$ positiv definit ist, existiert eine Quadratwurzel $\mathcal{N}^{1/2}$ und (2.1) läßt sich transformieren in

$$(\mathcal{N}^{-1/2}\mathcal{H}\mathcal{N}^{-1/2} - E)\mathcal{N}^{1/2}f = 0$$

oder

$$(H_C - E)g = 0 \quad (2.2)$$

mit

$$H_C = \mathcal{N}^{-1/2}\mathcal{H}\mathcal{N}^{-1/2}, \quad (2.2a)$$

$$g = \mathcal{N}^{1/2}f. \quad (2.2b)$$

Gl. (2.2) hat die gewünschte Form eines hermiteschen Eigenwertproblems.

Die Eigenfunktion in (2.2) ist g und nicht die Gewichtsfunktion f . Falls $|\psi\rangle$ im Vielteilchen-Hilbertraum normiert ist, so ist auch g im Raum $\mathcal{L}_2$ der q -abhängigen, quadratintegrierbaren Funktionen normiert. Eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation und daher eine physikalische Bedeutung kann für die normierte Funktion $g(q)$ angegeben werden, während dies für $f(q)$ nicht möglich ist.

Aus (2.2b) folgt, daß $f(q)$ nicht immer eine reguläre Funktion sein muß. In einigen Fällen ist $f(q)$ eine Distribution, was zur Folge hat, daß man in numerischen Anwendungen $f(q)$ nicht durch Diskretisierungsverfahren erhält. Es können deswegen normierte Zustände im Vielteilchen-Hilbertraum existieren, denen keine "gutartigen" Funktionen f entsprechen. Das instabile Verhalten von f ist normalerweise mit der Struktur des Eigenwertspektrums des Überlappoperators verbunden.

Bilden die erzeugenden Zustände ein übervollständiges System, so sind sie linear abhängig, woraus folgt, daß einige Eigenwerte des Überlappoperators verschwinden [TPG77]. Es soll jedoch betont werden, daß die in der Literatur erwähnten numerischen Schwierigkeiten bedingt durch sehr kleine Eigenwerte nicht unbedingt durch Übervollständigkeit erklärt werden können [CDT78]. Wie im folgenden diskutiert wird, kann Null ein Häufungspunkt der Eigenwerte von $\mathcal{N}$ sein. Deswegen wird in praktischen Rechnungen ein Abschneiden bei kleinen Eigenwerten erforderlich.

Falls der Überlappkern vom Hilbert-Schmidt-Typ ist, lautet deren Eigenwertproblem [La76, TPG77] :

$$\mathcal{N} u_k = n_k u_k, \quad n_k \geq 0; \quad k=1, 2, \dots \quad (2.3)$$

Die Eigenfunktionen bilden einen orthogonalen und vollständigen Satz im Raum $\mathcal{L}_2$:

$$\sum_k u_k(q) u_k^*(q') = \delta(q-q'), \quad (2.4)$$

$$\int dq u_k^*(q) u_{k'}(q) = \delta_{kk'}, \quad (2.5)$$

Der Kern von $\mathcal{N}^{1/2}$ läßt sich darstellen als

$$\mathcal{N}^{1/2}(q, q') = \sum_k u_k(q) \sqrt{n_k} u_k^*(q') . \quad (2.6)$$

Um die Inversion von $\mathcal{N}^{1/2}$ zu ermöglichen, muß man als Einschränkung hinnehmen, daß die Eigenfunktionen von $\mathcal{N}$ mit verschwindenden Eigenwerten weggelassen werden. Den von den Funktionen $u_k(q)$ mit $n_k \neq 0$ aufgespannten Raum nennt man den "kollektiven Unterraum". Dieser ist der kleinste Raum, der alle $|q\rangle$ enthält.

Der Kern von $\mathcal{N}^{-1/2}$ ist dann darstellbar als

$$\mathcal{N}^{-1/2}(q, q') = \sum_{\substack{k \\ n_k \neq 0}} u_k(q) \frac{1}{\sqrt{n_k}} u_k^*(q') . \quad (2.7)$$

Man kann die Funktion $g(q)$ nach den Funktionen u_k entwickeln:

$$g = \sum_k g_k u_k , \quad (2.8)$$

$$g_k = \int dq u_k^*(q) g(q) , \quad (2.8a)$$

wobei die Summe alle Werte von k durchläuft. Im Gegensatz zu (2.8) verlangt die Entwicklung von $f(q)$ in der selben Basis die Einschränkung auf k -Werte mit $n_k \neq 0$:

$$f(q) = \mathcal{N}^{-1/2} g = \sum_{\substack{k \\ n_k \neq 0}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} u_k(q) \quad (2.9)$$

Aber selbst wenn die verschwindenden Eigenwerte von (2.3) unberücksichtigt bleiben, kann man noch mit unendlich vielen Eigenwerten $n_k \neq 0$ konfrontiert werden, die $n_k = 0$ als Häufungspunkt besitzen, falls der kollektive Unterraum unendliche Dimension hat [La76, TPG77]. Daher kann ein Zustand $|\psi\rangle$ normiert sein, ohne daß $f(q)$ konvergiert. Diese Tatsache weist darauf hin, daß man sehr vorsichtig mit der Behandlung von $f(q)$ sein muß.

Man kann die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von $g(q)$ veranschaulichen. Man definiert die folgenden Zustände in

dem kollektiven Unterraum

$$|q\rangle_0 = \int dq' \mathcal{N}^{-1/2}(q', q) |q'\rangle = \sum_{\substack{k \\ n_k \neq 0}} u_k^*(q) \frac{1}{\sqrt{n_k}} \int dq' u_k(q') |q'\rangle, \quad (2.10)$$

die die Eigenschaft besitzen, orthogonal zu sein:

$$\langle q | q' \rangle_0 = \delta(q - q'). \quad (2.11)$$

Die Funktion $g(q)$ ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, um im kollektiven Zustand $|\psi\rangle$ den orthogonalen Zustand $|q\rangle_0$ zu finden

$$g(q) = \langle q | \psi \rangle, \quad (2.12)$$

$$\int dq |\langle q | \psi \rangle|^2 = 1.$$

Der Überlapp von $|\psi\rangle$ mit einem erzeugenden Zustand $|q\rangle$

$$\tilde{f} = \langle q | \psi \rangle \quad (2.13)$$

ist keine Wahrscheinlichkeitsamplitude und ist im Prinzip verschieden von $f(q)$ und $g(q)$

$$\tilde{f} = \mathcal{N} f = \mathcal{N}^{1/2} g. \quad (2.14)$$

Nur im Fall von orthogonalen Überlappkernen

$$\langle q | q' \rangle = \delta(q - q') \quad (2.15)$$

gilt

$$\tilde{f} = f = g. \quad (2.16)$$

Aber dann sind die Zustände $|q\rangle$ nicht mehr normierbar(es

handelt sich um ebene Wellen statt um Wellenpakete in der kollektiven Koordinate).

Für große Systeme ist eine direkte numerische Lösung der Integralgleichung (2.2) nicht durchführbar. In diesem Falle erwartet man aber, daß die GOA

$$\langle q|q' \rangle = e^{-\frac{\langle p^2 \rangle}{2} (q-q')^2}, \quad P = i \frac{\partial}{\partial q}, \quad (2.17)$$

eine vernünftige Beschreibung von kollektiven Phänomenen liefert. Die GOA hat den deutlichen Vorteil, eine weitere analytische Behandlung zu ermöglichen. Sie entspricht der adiabatischen Annahme der ATDHF-Methode: Beide sind für Systeme mit großer Teilchenzahl gültig (siehe Abschnitt II.3.1).

Die Gültigkeit der GOA kann man sich in den folgenden Betrachtungen plausibel machen. In dem Bereich kleiner Abstände $|q-q'| \ll 1$ ist der Überlappkern als eine Taylorreihe darstellbar:

$$\begin{aligned} \langle q|q' \rangle &= \langle q|q \rangle - i (q-q') \langle P \rangle - \frac{(q-q')^2}{2!} \langle P^2 \rangle + \dots \\ &= 1 - \frac{(q-q')^2}{2} \langle P^2 \rangle + \dots \\ &\simeq e^{-\frac{\langle P^2 \rangle}{2} (q-q')^2} \end{aligned}$$

Diese Form zeigt auch das korrekte Verhalten für große Abstände $|q-q'| \gg 1$:

$$\langle q|q' \rangle \rightarrow 0.$$

Der entscheidende Parameter, der das asymptotische Verhalten des Überlappkernes im Rahmen der GOA bestimmt, ist die Breite $\langle P^2 \rangle$. Da diese mit der Teilchenzahl anwächst, erhält man "schmalere" Überlapp für große Systeme. In dem Grenzfall $A \rightarrow \infty$ findet man für den Überlappkern mit Hilfe der δ -Funktion die Darstellung

$$\lim_{\langle P^2 \rangle \rightarrow \infty} \langle q|q' \rangle = \sqrt{\frac{2\pi}{\langle P^2 \rangle}} \delta(q-q'). \quad (2.18)$$

Es wird angenommen, daß $\langle P^2 \rangle$ entweder nicht von der

kollektiven Verschiebung abhängt, oder so eine glatte Abhängigkeit existiert, daß die Ableitungen von $\langle p^2 \rangle$ vernachlässigt werden können. Die q -Abhängigkeit von $\langle p^2 \rangle$ wird aber in manchen GCM-Formulierungen berücksichtigt [OU75, CD79].

Obwohl (2.17) kein Hilbert-Schmidt-Kern ist, ist eine Umwandlung in einen solchen Kern möglich [La76, TP78]. Der Gaußsche Überlappoperator besitzt keine verschwindenden Eigenwerte, jedoch besitzen seine Eigenwerte Null als Häufungspunkt.

Mit Hilfe von (2.17) kann man die Integralgleichung (2.2) in eine Differentialgleichung transformieren. Der normierte Energiekern wird in Potenzen von $(q-q')$ entwickelt:

$$\frac{\langle q|H|q' \rangle}{\langle q|q' \rangle} = H_0 + (q'-q) H_1 + \frac{(q'-q)^2}{2!} H_2 + \dots \quad (2.19)$$

Ein Vergleich mit der Taylorreihe für $\langle q|H|q' \rangle$ ergibt:

$$H_0 = \langle H \rangle$$

$$H_1 = -i \langle HP \rangle$$

$$H_2 = -(\langle HP^2 \rangle - \langle H \rangle \langle P^2 \rangle) = -\langle \bar{H} P^2 \rangle,$$

$$\bar{H} = H - \langle H \rangle, \quad (2.19a)$$

wobei alle Erwartungswerte bezüglich der erzeugenden Zustände zu verstehen sind. Die GOA läßt zu, die Potenzen von $(q-q')$ in die Ableitungen hineinzuziehen:

$$(q'-q) \mathcal{N}^p(q, q') = \frac{1}{\langle p^2 \rangle} \frac{d}{dq} \mathcal{N}^p(q, q') \quad (2.20)$$

$$(q'-q)^2 \mathcal{N}^p(q, q') = \left(\frac{1}{\langle p^2 \rangle^2} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{\langle p^2 \rangle} \right) \mathcal{N}^p(q, q')$$

$$\int dq dq'' \mathcal{N}^{-1/2}(q''', q) \left(\langle H \rangle - \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{2 \langle P^2 \rangle} - \frac{\langle HP \rangle}{\langle P^2 \rangle} P + \frac{1}{2} \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{\langle P^2 \rangle^2} P^2 + \dots \right) \mathcal{N}^{1/2}(q, q'') g(q'') - E g(q''') = 0$$

$$(2.21)$$

Der Entwicklungsparameter ist $1/\langle P^2 \rangle$, so daß für Systeme mit großer Teilchenzahl eine Konvergenz der Reihe zu erwarten ist. Der in P lineare Term wird bei der späteren Differentiation gebraucht.

Im Rahmen der GOA läßt sich eine differentielle Darstellung für den integralen Überlappoperator formulieren:

$$\mathcal{N} f = \sqrt{\frac{2\pi}{\langle P^2 \rangle}} e^{-\frac{1}{2\langle P^2 \rangle} P^2} f. \quad (2.22)$$

Daher folgt, daß

$$\mathcal{N}^{1/2} f = \sqrt[4]{\frac{2\pi}{\langle P^2 \rangle}} e^{-\frac{1}{4\langle P^2 \rangle} P^2} f. \quad (2.23)$$

Man erhält aus (2.21) eine Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} e^{\frac{1}{4\langle P^2 \rangle} P^2} \left(\langle H \rangle - \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{2\langle P^2 \rangle} - \frac{\langle H P \rangle}{\langle P^2 \rangle} P + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{\langle P^2 \rangle^2} P^2 + \dots \right) e^{-\frac{1}{4\langle P^2 \rangle} P^2} g = E g. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Entwickelt man die Exponentialoperatoren und behält man Terme in (2.24) bis zur zweiten Ordnung, so erhält man eine kollektive S-Gl.:

$$\begin{aligned} \left[\langle H \rangle - \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{2\langle P^2 \rangle} - \frac{1}{8\langle P^2 \rangle} \frac{d^2}{dq^2} \langle H \rangle + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} P \left(\frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{\langle P^2 \rangle^2} + \frac{1}{4\langle P^2 \rangle^2} \frac{d^2}{dq^2} \langle H \rangle \right) P \right] g = E g \end{aligned} \quad (2.25)$$

(Um die Hermitizität des Hamiltonoperators zu gewährleisten, muß man eigentlich den nächsten Term in (2.19) berücksichtigen [CD79]).

Die potentielle Energie in der S-Gl. (2.25) schließt neben dem klassischen Term $\langle H \rangle$ ZPE-Korrekturen ein.

Der erste Term des inversen Massenparameters in (2.25) ist mit der inversen Peirls-Yoccoz-Masse identisch. Der zweite,

der in der Transformation der Gl. für f in die Gl. für g entstand, ist proportional zu der Krümmung der Potentialenergie. Würde man die GCM-Masse und ZPE aus einer S-Gl. für f bzw. für $\tilde{f}$ bestimmen, würde man lediglich die jeweils ersten Terme erhalten.

Die Formulierung von Haff und Wilets [HW73, HW74, WTH75] benutzt eine Differentialgleichung für $f(q)$ und identifiziert den Massenparameter auf dieser Basis. Der auf diese Weise resultierende Massenparameter hat sich als sehr klein erwiesen. Die Begründung dafür wird aus der obigen Diskussion deutlich.

Als Erweiterung der Ideen von Peierls und Yoccoz haben auch Banerjee und Brink [BB73] eine Differentialgleichung für $f(q)$ vorgeschlagen. Jedoch ist eine Entwicklung in f nur für den Fall einer Symmetriebeschreibung gültig.

In der GCM-Ableitung der RPA, die von Jancovici und Schiff [JS64] bzw. Brink und Weiguny [BB68] vorgestellt wurde, werden komplexe Generatorkoordinaten benutzt. Der Gaußsche Überlapp entspricht in diesem Fall einer δ -Funktion in dem Bargmann-Raum der komplexen Funktionen. Deshalb ist es gleich bedeutend, ob man eine Differentialgleichung für f oder $\tilde{f}$ bzw. für g löst. Die Benutzung komplexer Parameter ist also wesentlich, damit f eine analytische Funktion ist.

Mit Hilfe eines Antikommutators kann man die inverse GCM-Masse, die man aus (2.25) erhält, in einen symmetrischen Ausdruck umwandeln:

$$\begin{aligned} M_{\text{GCM}}^{-1} &= \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{4 \langle P^2 \rangle^2} + \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{4 \langle P^2 \rangle^2} + \frac{\langle P \bar{H} P \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2} = \\ &= \frac{\langle \{P, \{\bar{H}, P\}\} \rangle}{\langle \{P, P\} \rangle} . \end{aligned} \quad (2.26)$$

Die ZPE können ihrerseits umgeschrieben werden in

$$E_{\text{ZPE}} = \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{2 \langle P^2 \rangle} + \frac{1}{8 \langle P^2 \rangle} \frac{d^2}{dq^2} \langle H \rangle = \frac{\langle P^2 \rangle}{2 M_{\text{GCM}}} + \frac{1}{8 \langle P^2 \rangle} \frac{d^2}{dq^2} \langle H \rangle . \quad (2.27)$$

Der erste Term in (2.27) ist die kinetische ZPE, der zweite die potentielle ZPE.

Die folgenden Formeln fassen die Ergebnisse dieses Abschnitts zusammen. Man hat die folgende S-Gl. erhalten:

$$H_c g(q) = E g(q) \quad , \quad (2.28)$$

wobei

$$H_c = \frac{1}{2} P M_{GCM}^{-1} P + V(q) \quad (2.28a)$$

$$M_{GCM}^{-1} = \frac{\langle \{P, \{\bar{H}, P\}\} \rangle}{4 \langle P^2 \rangle^2} \quad (2.28b)$$

$$V(q) = \langle H \rangle - \frac{\langle P^2 \rangle}{2 M_{GCM}(q)} - \frac{1}{8 \langle P^2 \rangle} \frac{d^2}{dq^2} \langle H \rangle \quad (2.28c)$$

II.3 Beziehung zu anderen kollektiven Methoden

In der Literatur findet man zwei grundsätzliche verschiedene Zugänge zur mikroskopischen Diskussion der kollektiven Kernbewegungen. Auf der einen Seite gibt es zeitabhängige Methoden, wie e.g. das Cranking-Modell und die ATDHF-Theorie. Hier erhält man einen klassischen, kollektiven Hamiltonoperator, für den ein Quantisierungsverfahren erforderlich ist. Der Grund für den teilweisen Verlust quantenmechanischer Aspekte in der ATDHF-Methode ist die Einschränkung auf Slaterdeterminanten und die daraus folgende Nichtlinearität der Theorie. Auf der anderen Seite stellt die GCM ein zeitunabhängiges Verfahren dar, das das Superpositionsprinzip der Quantenmechanik berücksichtigt, so daß eine nachträgliche Quantisierung nicht notwendig ist. In den letzten Jahren wurde eine andere, zeitabhängige Methode entwickelt, die die Feynmanschen Pfadintegrale benutzt. Im folgenden werden die Grundlagen aller dieser Methoden unter Betonung von möglichen Analogien diskutiert.

II.3.1 ATDHF-Theorie

In der stationären HF-Theorie versucht man, einen Zustand des Vielteilchensystems in dem Einteilchenbild optimal darzustellen. Dies gelingt durch Berücksichtigung von Slaterdeterminanten als Ansatz in dem stationären Variationsprinzip.

Eine Erweiterung auf die zeitabhängige Situation läßt sich direkt formulieren. Jetzt bilden zeitabhängige Slaterdeterminanten ein Ansatz in dem zeitabhängigen Variationsprinzip. Dieses Verfahren ist unter der Bezeichnung "zeitabhängige Hartree-Fock Theorie" (Time-dependent Hartree-Fock, TDHF) bekannt. Man kann im Rahmen dieser Formulierung eine Parametrisierung der TDHF-Zustände einführen, so daß ein kollektiver Prozeß anschaulich beschrieben werden kann. Kollektivität verlangt im allgemeinen eine zumindest partielle Entkopplung eines kollektiven Unterraumes von dem komplementären Raum. Man nimmt an, daß diese Entkopplung in Verknüpfung mit kleinen Geschwindigkeiten des kollektiven Prozesses vorkommt (adiabatische Annahme). Die kollektive Parametrisierung unter der adiabatischen Annahme bezeichnet man als ATDHF-Theorie.

In diesem Abschnitt stellen wir die Grundlagen der ATDHF-Methode, sowie eine Variante der GCM, die der ATDHF-Methode ähnlich ist, vor.

In der Diskussion der ATDHF-Methode wird der auf Vektorzustände beruhende Formalismus von Villars [Vi75, Vi77] benutzt, anstelle des damit verwandten Formalismus von Baranger und Veneroni [BV78, GR80], der sich auf Dichtematrizen stützt.

Ein zeitgerader Vielteilchenzustand $|q\rangle$, den man üblich als eine Slaterdeterminante oder einem Hartree-Fock-Bogoliugov-Zustand (HFB) ansieht, kann als eine Taylorreihe in Bezug auf einem Referenzzustand $|0\rangle$ ausgedrückt werden:

$$|q\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iq)^n}{n!} (P^n |q\rangle)_{q=0} = e^{-iqP} |0\rangle. \quad (2.29)$$

Der kollektive Unterraum $\{|q\rangle\}$ wird mit dem kollektiven Impulsoperator P spezifiziert, i.e. wenn ein Zustand angegeben wird, kennt man auch einen benachbarten Zustand:

$$|q + \delta q\rangle = (1 - i \delta q P) |q\rangle. \quad (2.30)$$

Da man Slaterdeterminanten bzw. HFB-Zustände entlang eines Pfades erhalten möchte (wir verstehen hier unter Pfad eine Bahn $|q(t)\rangle$), muß gefordert werden, daß P ein Einteilchenoperator ist. Dabei darf man sich auf Operatoren beschränken, die nur Teilchen-Loch Komponenten besitzen, da Teilchen-Teilchen und Loch-Loch Komponenten lediglich zu einer Änderung der Zustandsphase führen würden.

Für reelle Werte des kollektiven Koordinaten q und für hermitesche, zeitungerade Operatoren P , wird bei der Transformation (2.29) sowohl die Norm als auch die Zeitumkehrparität erhalten. Der Zustand $|q\rangle$ ist normiert und zeitgerade, falls der Referenzzustand $|0\rangle$ diese Eigenschaften besitzt.

Ein zeitabhängiger Zustand, der eine dynamische Situation darstellt, muß jedoch eine zeitungerade Komponente enthalten. Es gibt zwei Möglichkeiten, dieser Anforderung mit dem Ansatz (2.29) zu genügen:

i) Man führt eine zweite Transformation durch [Vi77,BV78]:

$$|qh\rangle = e^{i\hbar Q} |q\rangle, \quad (2.31)$$

wobei p reell und Q ein zeitgerader, hermitescher Operator ist. Diese Transformation ist die Grundlage der ATDHF-Theorie.

ii) Man läßt zu, daß q komplex wird [Pr70,ABC77a,RRB74,Re74]:

$$|qq'\rangle = e^{-i(q+iq')P} |0\rangle = e^{q'P} |q\rangle. \quad (2.32)$$

Dieses Verfahren entspricht der zeitabhängigen GCM (Time dependent GCM, TDGCM). Im Gegensatz zu der Transformation (2.31), ist die Transformation (2.32) nicht unitär und Renormierung wird benötigt.

In der ATDHF-Methode gewinnt man den kollektiven Hamiltonoperator durch Entwicklung des Erwartungswertes des mikroskopischen Hamiltonoperator mit dem Ansatz (2.31) bis zur zweiten Ordnung in p . Man erhält

$$\mathcal{H}_{\text{ATDHF}}(q, \hbar) = \langle q\hbar | H | q\hbar \rangle = \langle q | H | q \rangle + \frac{\hbar^2}{2} \langle q | [Q, [H, Q]] | q \rangle. \quad (2.33)$$

Der Erwartungswert des Operators P ist

$$\langle q\hbar | P | q\hbar \rangle = i\hbar \langle q | [Q, P] | q \rangle = \hbar. \quad (2.34)$$

Der parameter p ist, angesichts der von Q und P geforderten "schwachen" Vertauschungsrelation, als kollektiver Impuls zu identifizieren ("schwache" Vertauschungsrelation bedeutet, daß der Erwartungswert des Kommutators zwischen Q und P bezüglich der Zustände des kollektiven Unterraumes gleich i sein muß). Die Einschränkung auf eine Entwicklung zweiter Ordnung in p ist als ein Ausdruck der Adiabaticität zu verstehen.

In (2.33) findet man die kollektive potentielle Energie

$$V(q) = \langle q | H | q \rangle \quad (2.35)$$

und den kollektiven Massenparameter

$$M_{\text{ATDHF}}^{-1}(q) = \langle q | [Q, [H, Q]] | q \rangle. \quad (2.36)$$

Aus dem zeitabhängigen Variationsprinzip kann man schließen, daß die Variablen q und p klassische Hamiltonsche Gleichungen erfüllen [Vi77, BV78]. Die Methode ergibt ferner ein Verfahren, das die Zustände $|q\rangle$ und die Operatoren Q und P optimiert (siehe Abschnitt II.3.1), so daß man den "besten" kollektiven Unterraum erhalten kann.

Andererseits erhält man mit der Transformation (2.32) bis zur zweiten Ordnung in q' den klassischen Hamiltonoperator der TDGCM:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{GCM}}(q, q') &= \frac{\langle qq' | H | qq' \rangle}{\langle qq' | qq' \rangle} = \frac{\langle q | H | q \rangle + \frac{q'^2}{2} \langle q | \{P, \{H, P\}\} | q \rangle}{1 + 2 q'^2 \langle q | P^2 | q \rangle} \\ &= \langle q | H | q \rangle + \frac{q'^2}{2} \langle q | \{P, \{\bar{H}, P\}\} | q \rangle. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Der Erwartungswert des Operators P ist in diesem Falle

$$\frac{\langle qq' | P | qq' \rangle}{\langle qq' | qq' \rangle} = 2 q' \langle q | P^2 | q \rangle = \hbar, \quad (2.38)$$

was darauf hinweist, daß der imaginäre Teil der kollektiven Variable multipliziert mit dem Faktor $2\langle P^2 \rangle$ als kollektiver Impuls identifiziert werden muß.

Unter Verwendung von (2.38) in (2.37) erhält man für den klassischen Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{GCM}}(q, q') = \mathcal{H}_{\text{GCM}}(q, \hbar) = \langle q | H | q \rangle + \frac{\hbar^2}{2} \frac{\langle q | \{P, \{\bar{H}, P\}\} | q \rangle}{4 \langle q | P^2 | q \rangle^2}, \quad (2.39)$$

der sich von dem klassischen Grenzfall von (2.28) durch die Abwesenheit von ZPE sich unterscheidet (das Superpositionsprinzip, das die stationäre GCM charakterisiert, wurde in

diesem Falle nicht benutzt). Der Gl. (2.39) entnimmt man die gleiche potentielle Energie wie der ATDHF-Methode, als auch den Massenparameter

$$M_{GCM}^{-1}(q) = \frac{\partial^2}{\partial h^2} \mathcal{H}_{GCM}(q, h) = \frac{\langle q | \{P, \{\bar{H}, P\}\} | q \rangle}{4 \langle q | P^2 | q \rangle^2}, \quad (2.40)$$

der mit (2.28b) übereinstimmt. Die TDGCM ergibt eine alternative und etwas einfachere Ableitung des GCM-Massenparameters. Die Massenparameter (2.36) und (2.40) sind für kohärente Zustände identisch [ABC77b, GR78, GR80]. Da diese Zustände einen deutlichen "klassischen Charakter" haben, ist es nicht verwunderlich, daß für solche Zustände die "klassische" ATDHF-Methode dasselbe Resultat wie die quantenmechanische GCM liefert.

Die Beschränkung der GCM-Darstellung desklassischen, kollektiven Hamiltonoperators auf Terme bis zur zweiten Ordnung in q' ist vertretbar, wenn der imaginäre Teil der komplexen Generatorkoordinaten klein genug ist:

$$|q'| \ll 1 \quad (2.41)$$

oder, mit Hilfe von (2.38),

$$|h| \ll 2 \langle P^2 \rangle. \quad (2.42)$$

Die Erfüllung dieser Bedingung (adiabatischer Grenzfall) ist für Systeme mit genügend großer Teilchenzahl zu erwarten. Die Bedingung (2.42) kann mit der auf der Basis der Heisenbergschen Relation hergeleiteten Villarschen Bedingung [Vi75, Vi77] verglichen werden. Die letzte Bedingung ist etwas einschränkender. Die adiabatische Situation, die mit (2.41) gefordert wird, ist eine hinreichende, aber nicht notwendige Bedingung für die Beschränkung auf die ersten Termen der Entwicklung des kollektiven Hamiltonoperators.

II.3.2 Das Kurbelmodell

Das Kurbel- oder Cranking-Modell, das auf Inglis zurückgeht [In54, In55, In56], stützt sich auf die zeitabhängige Störungstheorie unter Berücksichtigung der adiabatischen Näherung [Wi64].

In diesem Modell geht man von der Annahme aus, daß die kollektive Variable direkt in dem Hamiltonoperator, der zur Diskussion steht, enthalten ist. Das einfachste Beispiel ist ein Schalenmodell, dessen Einteilchenpotential den kollektiven Parameter enthält. Die Eigenzustände eines solchen Modellproblems bilden die sogenannte adiabatische Basis:

$$H_{SM}(q) |\phi_n(q)\rangle = e_n(q) |\phi_n(q)\rangle, \quad n=0,1,2,\dots \quad (2.43)$$

Nimmt man an, daß die Koordinate $q=q(t)$ eine zeitabhängige, klassische Variable ist, so kann man die Lösung der zeitabhängigen S-Gl.:

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = H_{SM}(q) |\psi(t)\rangle \quad (2.44)$$

nach der adiabatischen Basis entwickeln

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) |\phi_n(q(t))\rangle \quad (2.45)$$

Für die Entwicklungskoeffizienten ergibt sich das bekannte Gleichungssystem:

$$\dot{c}_n = -i \sum_{m=0}^{\infty} c_m(t) \langle n | \frac{\partial}{\partial q} | m \rangle e^{\frac{1}{i} \int_0^t (e_m(t') - e_n(t')) dt'} \quad n=0,1,2,\dots \quad (2.46)$$

Unter Verwendung der Normierung des Zustands $|\psi\rangle$ ist der Erwartungswert des Hamiltonoperators H_{SM} bezüglich des Zustands $|\psi\rangle$ folgender:

$$E = \langle \psi | H_{SM}(q) | \psi \rangle = e_0(q) + \sum_{n \neq 0} |c_n|^2 (e_n - e_0) \quad (2.47)$$

Ist die kollektive Bewegung adiabatisch, i.e. läuft der kollektive Prozeß langsam im Vergleich zu typischen Einteilchenbewegungen ab, so ist die Integration des Differentialgleichungssystems leicht durchführbar. Die folgende Annahmen drücken die Adiabaticität aus:

i) Das System wird am Anfang in einem Zustand $|\phi_0(t)\rangle$ präpariert. Die Zeitentwicklung des Systems verändert die Werte der Koeffizienten nicht stark:

$$c_n(t) \simeq \delta_{n0}.$$

ii) Die zeitliche Änderung in (2.46) wird allein durch den Exponentialfaktor bedingt:

$$\dot{q}(t) \langle n | \frac{\partial}{\partial q} | 0 \rangle_t \simeq \dot{q}(0) \langle n | \frac{\partial}{\partial q} | 0 \rangle_{t=0}.$$

Mit diesen Annahmen folgt, daß

$$c_n(t) = i \dot{q} \langle n | \frac{\partial}{\partial q} | 0 \rangle \frac{e^{\frac{1}{i} \int_0^t (e_0(t') - e_n(t')) dt'}}{e_n - e_0}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.48)$$

ist, wobei die Integrationskonstante gleich Null gesetzt wurde. Setzt man (2.48) in (2.47) ein, so erhält man die kollektive Energie

$$E = e_0(q) + \frac{1}{2} M_c(q) \dot{q}^2 \quad (2.49)$$

mit

$$M_c(q) = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | \frac{\partial}{\partial q} | 0 \rangle|^2}{e_n - e_0}. \quad (2.50.)$$

Den Ausdruck (2.49) kann man als klassischen, kollektiven Hamiltonoperator interpretieren. Der erste Term in (2.49) ist die potentielle Energie, die (2.35) entspricht. Der zweite Term ist die kinetische Energie, in der der Massenparameter durch die Cranking-Formel (2.50) gegeben ist.

Da sowohl bei dem Kurbelmodell als auch bei der ATDHF-Methode bzw. der TDGCM der Massenparameter durch den Erwartungswert des Hamiltonoperators identifiziert wird, ist eine oberflächliche Ähnlichkeit gegeben. Die konkrete Beziehung der Cranking-Masse zu den GCM- und ATDHF-Massen wird später dargestellt (siehe Abschnitt III.2 bzw. III.3).

II.3.3 Pfadintegralmethode

Die Pfadintegralmethode (Path integral method, PIM) erlaubt eine Erläuterung der TDHF- bzw. ATDHF-Theorien. Hier wird der Formalismus von Reinhardt [Re80, Re81] benutzt, von dem eine Übersicht vorliegt [Re82]. In diesen Veröffentlichungen kann eine ausführlichere Diskussion nachgeschlagen werden.

In der Feynmanschen Pfadintegralmethode wird der quantenmechanische Propagator durch ein Funktionalintegral über alle "Pfade" dargestellt. Bei der Beschreibung der kollektiven Bewegungen eines Systems mit dieser Methode entspricht jeder Pfad einer zeitabhängigen Dichtematrix, bzw. einer Slaterdeterminante. Das mit jedem Pfad verknüpfte Gewicht hängt von einer kollektiven Wirkung ab:

$$\langle \Psi_2(t_2) | U(t_2, t_1) | \Psi_1(t_1) \rangle = (\det V)^{1/2} \int \mathcal{D}\rho(t) e^{iS[\rho]}, \quad (2.51)$$

$$S[\rho] = \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} dt \operatorname{Tr}(\rho V \rho) - i \log \langle \Psi_2 | U[\rho](t_2, t_1) | \Psi_1 \rangle, \quad (2.51a)$$

wobei $U[\rho]$ der Zeitentwicklungsoperator ist, der einen der Dichtematrix $\rho(t)$ entsprechenden HF-Hamiltonoperator benutzt.

Das Superpositionsprinzip wird wie bei der GCM in die Theorie eingebaut. Die zwei Methoden unterscheiden sich aber dennoch: die PIM benutzt eine Superposition von Funktionen, während der GCM eine Superposition über Parameter zugrunde liegt.

Das übliche Näherungsverfahren für die Berechnung des Integrals (2.51) ist die stationäre Phasennäherung (Stationary Phase Approximation, SPA). Dabei wird angenommen, daß nur ein spezifischer Pfad $\tilde{\rho}(t)$ (i. e. also: eine Dichtematrix bzw. eine Slaterdeterminante) zu dem Funktionalintegral (2.51.) wesentlich beiträgt:

$$\langle \psi_2 | U(t_2, t_1) | \psi_1 \rangle \propto e^{iS[\tilde{\rho}]} \quad (2.52)$$

$\tilde{\rho}$ minimiert die Wirkung (2.51a) und kann daher als ein "klassischer" Pfad interpretiert werden. Das aus der SPA folgende $\tilde{\rho}$ genügt der selbstkonsistenten TDHF-Gl., die demnach als eine "klassische" Gl. angesehen werden kann:

$$\left. \frac{\delta S[\rho]}{\delta \rho} \right|_{\rho=\tilde{\rho}} = 0 \Rightarrow i\partial_t \tilde{\rho} = [H[\tilde{\rho}], \tilde{\rho}]. \quad (2.53)$$

Zu diesem "klassischen" Bild können im Rahmen der PIM quantenmechanische Korrekturen systematisch hinzugefügt werden. Für gebundene Zustände liefert die Randbedingung für $\tilde{\rho}$ eine semiklassische Quantisierungsvorschrift, die Ähnlichkeiten mit der Vorschrift von Bohr und Sommerfeld hat. Auch zu diesem Quantisierungsverfahren kann man Korrekturen berechnen, indem man Fluktuationen um den "klassischen" Grenzfall berücksichtigt. Ausgangspunkt für die Berechnung von Korrekturen ist die Entwicklung der Wirkung um die "klassische" Lösung $\tilde{\rho}$:

$$S[\rho] = S[\tilde{\rho}] + \frac{1}{2} \iint dt dt' \delta \rho(t) \delta \rho(t') \left. \frac{\delta^2 S}{\delta \rho(t) \delta \rho(t')} \right|_{\rho=\tilde{\rho}} + \dots \quad (2.54)$$

Die PIM bildet also ein Verfahren, das dazu geeignet ist, die TDHF-Theorie auf durchsichtige Weise in die Quantenmechanik einzubetten. Da die PIM eine semiklassische Quantisierungsvorschrift ergibt, läßt sie sich zwischen der "klassischen" ATDHF-Methode und der vollen quantenmechanischen GCM einordnen.

Auch die Bedingung der Adiabaticität kann in dem PIM-Formalismus verwirklicht werden. Gebundene Zustände, die periodischen TDHF-Orbitalen entsprechen, wurden unter der adiabatischen Annahme schon in der Literatur berücksichtigt [GRR82].

Da wir in dieser Arbeit hauptsächlich an Zerfallsproblemen interessiert sind, zeigen wir jetzt noch, daß die übliche Wenzel-Kramers-Brillouin-(WKB) Formel für die Berechnung von Spaltwahrscheinlichkeiten auf eine elegante Weise im Rahmen der PIM plus SPA hergeleitet werden kann.

Das Durchtunneln einer Barriere läßt sich durch die Fortsetzung der TDHF-Gl. (2.53) nach imaginären Zeiten $\tau = -i\zeta$ beschreiben

$$-\partial_{\zeta} \tilde{\rho} = [h[\tilde{\rho}], \tilde{\rho}] \quad (2.55)$$

Tunnelphänomene können so gewissermaßen auf Probleme gebundener Zustände reduziert werden. Die Wirkung, die der Lösung von (2.55) entspricht, lautet [Re82]

$$S[\tilde{\rho}] = i \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} d\zeta \left\{ \text{tr}(\tilde{\rho} \partial_{\zeta} \tilde{\rho}) + E_{\text{HF}}[\tilde{\rho}(\zeta)] \right\}$$

oder, wenn man annimmt, daß die Zeitabhängigkeit einer einzigen Koordinate zugeschrieben wird,

$$= i \int_{t_1}^{t_2} dt \, \hbar \dot{q} - E_{\text{HF}} \cdot (t_2 - t_1). \quad (2.56)$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit wird dann

$$\begin{aligned} |\langle \psi_2 | U(t_2, t_1) | \psi_1 \rangle|^2 &\propto |e^{iS[\tilde{\rho}]}|^2 = \\ &= \left| e^{-\int_{t_1}^{t_2} dt \, \hbar \dot{q}} \right|^2 = e^{-2\text{Re}(\int_{t_1}^{t_2} \hbar \dot{q} dt)} = e^{-2\int_{t_1}^{t_2} dq \sqrt{2M(q)(V(q)-E)}} \end{aligned} \quad (2.57)$$

Sie ist mit der bekannten WKB-Formel identisch. Die erste

quantenmechanische Korrektur zu (2.57) erhält man in dieser Theorie, indem man die oben geschilderte Entwicklung der Wirkung bis zur zweiten Ordnung vornimmt.

Was die Güte der Näherung (2.57) betrifft, so ist es naheliegend, eine Analogie mit dem Problem gebundener Zustände herzustellen. Im letzteren Fall sind, dem Korrespondenzprinzip entsprechend, hoch angeregte Zustände durch die einfache WKB-Näherung gut beschreibbar. Ebenso sollte die Formel (2.57) eine gute Näherung bilden, wenn die Differenz zwischen Schwellenenergie E_{th} (Sattelpunktenergie) und Spaltenergie E groß ist.

Für eine parabolische Barriere (umgekehrtes Oszillatorpotential) ist eine exakte Lösung möglich. Man kann sie also zu einer Überprüfung der obigen Aussage benutzen.

Die exakte Durchlässigkeit ist [Wi64]

$$P = (1 + e^K)^{-1}, \quad K = \frac{-2\pi(E - E_{th})}{\omega} \quad (2.58)$$

Andererseits ist das einfachste WKB-Resultat nach (2.57)

$$P = e^{-K} \quad (2.59)$$

und eine verbesserte WKB-Formel (Jordan-WKB, JWKB) kann bereits die exakte Lösung (2.58) reproduzieren. Da der Exponent K proportional zur Höhe der Barriere ist, ist die WKB-Formel für die Beschreibung von spontaner Spaltung besser geeignet als für die Beschreibung von induzierter Spaltung.

III Der GCM-Massenparameter

III.1 Die GCM-Massenformel

In diesem Kapitel soll der GCM-Massenparameter untersucht und mit

- der Inglis'schen Cranking-Masse (Abschnitt III.2)
 - sowie der ATDHF-Masse bzw. deren möglichen Approximationen (Abschnitt III.3)
- verglichen werden.

Ausgangspunkt ist die Formel (2.28b), die in den Abschnitten II.2 und II.3.1 abgeleitet wurde.

Mit der Annahme, daß $\langle \bar{H} P^2 \rangle$ reell ist und daher $\langle \bar{H} P^2 \rangle = \langle P^2 \bar{H} \rangle$ gilt, kann der inverse GCM-Massenparameter (2.28b) in zwei Anteile zerlegt werden:

$$M_{\text{GCM}}^{-1}(q) = \frac{\langle P \bar{H} P \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2} + \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{2 \langle P^2 \rangle} \quad (3.1)$$

Der erste Term ist proportional zu einer Anregungsenergie, die von einer "Translation" des Zustandes in dem kollektiven Raum herrührt. Der zweite Term ist proportional zu einem nicht normierten Korrelationskoeffizient (auch Kovarianz genannt [Me70, Fa82]) der Operatoren H und P^2

$$\langle \bar{H} P^2 \rangle = \langle \bar{H} \bar{P}^2 \rangle = \langle (H - \langle H \rangle)(P^2 - \langle P^2 \rangle) \rangle, \quad (3.2)$$

die den Abhängigkeitsgrad ("Korrelation") zwischen H und P abschätzt. Wir bezeichnen deswegen den ersten bzw. den zweiten Term in (3.1) Anregungs- und Korrelationsterme.

Eine obere Grenze für den Korrelationsbeitrag, die von der Energiestreuung (mittlere quadratische Abweichung in der Energie) der erzeugenden Zustände bestimmt wird, kann leicht angegeben werden. Mit Hilfe der Schwartzschen Ungleichung

$$|\langle \bar{H} P^2 \rangle|^2 = |\langle \bar{H} \bar{P}^2 \rangle|^2 \leq \langle \bar{H}^2 \rangle \langle \bar{P}^2{}^2 \rangle$$

und der in der GOA gültigenden Relationen

$$\langle P^4 \rangle = 3 \langle P^2 \rangle^2$$

$$\langle \bar{P}^2 \rangle = \langle P^4 \rangle - \langle P^2 \rangle^2 = 2 \langle P^2 \rangle^2$$

gelangt man zu

$$\left| \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2} \right|^2 \leq \left(\frac{\langle \bar{H}^2 \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2} \right)^{1/2}. \quad (3.3)$$

Ist P ein Symmetrieoperator des Hamiltonoperators H

$$[P, H] = 0,$$

so sind die Anregungs- und Korrelationsterme identisch und man findet die bekannte Peierls-Yoccoz-Formel [PY57, Yo57]

$$M_{GCM}^{-1}(q) = \frac{\langle P \bar{H} P \rangle}{\langle P^2 \rangle^2} = \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{\langle P^2 \rangle^2} = M_{PY}^{-1}(q). \quad (3.4)$$

Diese ist für Translationen und Rotationen gültig.

In diesem Falle kann man die Ungleichung (3.3) anwenden, um eine untere Grenze für die Masse zu erhalten:

$$M_{PY}(q) \geq \left(\frac{\langle P^2 \rangle^2}{2 \langle \bar{H}^2 \rangle} \right)^{1/2} \quad (3.5)$$

Für andere kollektive Moden, wie e.g. Schwingungen und Spaltung, gilt die Identität der zwei Beiträge nicht. Man erwartet, daß der Anregungs- den Korrelationsterm überwiegt, wenn die Energiestreuung klein ist, i.e. wenn der erzeugende Zustand eine vernünftige Näherung eines Eigenzustandes von H ist.

Im folgenden wollen wir den Fall von Schwingungen und Spaltung untersuchen. Die besonderen Probleme, die bei der Anwendung auf Translationen und Drehungen auftreten, werden in Abschnitt V.1 diskutiert.

III.2 Vergleich mit der Inglisschen Kurbelmasse

Zunächst wird die GCM-Masse mit der Inglisschen Cranking Masse verglichen. Wie in Abschnitt II.3.2 bereits vorgestellt, beruht die Cranking-Näherung von Inglis auf einem Einteilchen-schalenmodell.

Der Cranking-Massenparameter (2.50) läßt sich in kompakter Weise schreiben als

$$M_C(q) = 2 \langle 0, q | P \bar{H}_{SM}^{-1} P | 0, q \rangle$$

oder, mit der Identifizierung $|q\rangle \equiv |0, q\rangle$, auch als

$$= 2 \langle q | P \bar{H}_{SM}^{-1} P | q \rangle. \quad (3.6)$$

Benutzt man eine entsprechende Näherung für die Berechnung des GCM-Massenparameters, i.e. ersetzt man in Gl.(3.1) den "wirklichen" Hamiltonoperator" durch eine passende Schalenmodellvorstellung, so findet man, daß der Korrelationsbeitrag verschwindet. Der verbleibende Beitrag

$$M_E^{-1}(q) = \frac{\langle P \bar{H}_{SM} P \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2} \quad (3.7)$$

kann mit dem Cranking-Resultat (3.6) direkt verglichen werden. Durch Anwendung der Schwartzschen Ungleichung folgt

$$M_E^{-1}(q) M_C(q) = \frac{\langle P \bar{H}_{SM} P \rangle \langle P \bar{H}_{SM}^{-1} P \rangle}{\langle P^2 \rangle^2} \geq \frac{|\langle P \bar{H}_{SM} \bar{H}_{SM}^{-1} P \rangle|^2}{\langle P^2 \rangle^2} = 1$$

und daher

$$M_E(q) \leq M_C(q). \quad (3.8)$$

Die Schalenmodellnäherung der GCM-Masse kann nicht größer als die Cranking-Masse sein. Gleichheit besteht, falls $|q\rangle$ ein Eigenzustand des Schalenmodell-Hamiltonoperators ist:

$$H_{SM} P |q\rangle \propto P |q\rangle . \quad (3.9)$$

Benutzt man die auf das Schalenmodell bezogenen Momente

$$m_k(F) = \sum_n | \langle n | F | 0 \rangle |^2 (e_n - e_0)^k, \quad k=0, \pm 1, \dots, \quad (3.10)$$

so lassen sich der Cranking- bzw. der geeignete GCM-Ausdruck darstellen als

$$M_C = 2 m_{-1}(P), \quad (3.11)$$

$$M_E = \frac{2(m_0(P))^2}{m_1(P)}. \quad (3.12)$$

Die Ungleichung (3.8) kann folgendermaßen

$$m_1(P) m_{-1}(P) \geq (m_0(P))^2 \quad (3.13)$$

geschrieben werden.

III.2 Vergleich mit der ATDHF-Masse und ihren Näherungen

III.2.1 Komplette ATDHF-Theorie

In Abschnitt II.3.1 haben wir den Massenparameter der ATDHF-Theorie hergeleitet (siehe Gl. (2.36)).

Dieser Massenparameter kann man als eine quadratische Form schreiben, wenn man die Vollständigkeitsrelation einer Teilchen-Loch Basis benutzt:

$$M_{\text{ATDHF}}^{-1}(q) = \begin{pmatrix} Q^* & -Q \end{pmatrix} S \begin{pmatrix} Q \\ -Q^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q^* & Q \end{pmatrix} \mathcal{M}^{-1} \begin{pmatrix} Q \\ Q^* \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Hierbei bestehen die Reihen- und Spaltenvektoren aus den Teilchen-Loch Matrixelementen von Q . S ist die sogenannte Stabilitätsmatrix. Sie besitzt eine RPA-Struktur, wird aber aus einem q -abhängigen Zustand konstruiert

$$S = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

$$A_{hh',h'h'} = \langle q | a_h^\dagger a_h (\bar{H}_{\text{HF}} + V_{\text{res}}) a_{h'}^\dagger a_{h'} | q \rangle$$

$$B_{hh',h'h'} = \langle q | a_h^\dagger a_h a_{h'}^\dagger a_{h'} V_{\text{res}} | q \rangle$$

$$H_{\text{HF}} = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{v}_{ij,ij}$$

$$V_{\text{res}} = \frac{1}{4} \sum_{ij,kl} \hat{v}_{ij,kl} : a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k : ,$$

wobei $\hat{v}_{ij,kl}$ antisymmetrisierte Matrixelemente des mikroskopischen Potentials sind und die Doppelpunkte das Wicksche Normalprodukt bezeichnen. $\mathcal{M}^{-1}$ ist der inverse Massentensor:

$$\mathcal{M}^{-1} = \eta S \eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & -B \\ -B^* & A^* \end{pmatrix}$$

(3.16)

Der Operator Q und die Zustände $|q\rangle$ sollen den ATDHF-Gleichungen genügen. Die erste Gl. ist eine HF-Gl. mit einer Zwangsbedingung (Constrained Hartree-Fock, CHF), wobei Q die Rolle des Operators der Nebenbedingung übernimmt:

$$\langle \delta\phi(q) | H - \lambda Q | \phi(q) \rangle = 0. \quad (3.17)$$

Die zweite Gl. ist

$$\langle \delta\phi(q) | [H, Q] + i \frac{P}{M_{\text{ATDHF}}(q)} | \phi(q) \rangle = 0. \quad (3.18)$$

Diese kann in Matrixform umgeschrieben werden:

$$-i M_{\text{ATDHF}}^{-1}(q) \begin{pmatrix} P \\ -P^* \end{pmatrix} = \mathcal{M}^{-1} \begin{pmatrix} Q \\ Q^* \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Eine dritte Gl. wird benötigt, um die Konsistenz der Theorie zu gewährleisten [MP82]

$$\langle \delta\phi(q) | \frac{1}{2} [Q, [H, Q]] - \frac{1}{2} \frac{\partial M_{\text{ATDHF}}^{-1}}{\partial q} Q + M_{\text{ATDHF}}^{-1} \frac{\partial Q}{\partial q} | \phi(q) \rangle = 0. \quad (3.20)$$

Mit Hilfe der "schwachen" Vertauschungsrelation zwischen Q und P

$$(Q^* - Q) \begin{pmatrix} P \\ P^* \end{pmatrix} = i \quad (3.21)$$

erhält man aus (3.19) den folgenden Ausdruck für die ATDHF-Masse

$$M_{\text{ATDHF}}(q) = \begin{pmatrix} P^* & P \end{pmatrix} S^{-1} \begin{pmatrix} P \\ P^* \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Die Ausdrücke (3.14) und (3.22) sind äquivalent für selbstkonsistente Lösungen, i.e. für optimierte Zustände $|q\rangle$ und optimier-

te Operatoren Q und P .

Der Massenparameter der GCM-Formulierung (2.28b) läßt sich analog der Gl. (3.14) in Matrixform darstellen

$$M_{\text{GCM}}^{-1}(q) = \frac{1}{4\langle P^2 \rangle^2} (P^* P) S \begin{pmatrix} P \\ P^* \end{pmatrix} = \frac{1}{4\langle P^2 \rangle^2} (P^* - P) M^{-1} \begin{pmatrix} P \\ -P^* \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Der erste bzw. der zweite Term wird durch die Untermatrizen A bzw. B bestimmt. Vorausgesetzt daß die Untermatrizen A und B reell sind, bestehen die Beziehungen:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \bar{P} H P \rangle}{2\langle P^2 \rangle^2} &= \frac{1}{2\langle P^2 \rangle^2} \sum_{kh} \sum_{k'h'} P_{kh}^* A_{kh, k'h'} P_{k'h'} \\ &= \frac{1}{2\langle P^2 \rangle^2} (P^*, AP) \quad ; \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{2\langle P^2 \rangle^2} &= \frac{1}{2\langle P^2 \rangle^2} \sum_{kh} \sum_{k'h'} B_{kh, k'h'}^* P_{kh} P_{k'h'} \\ &= -\frac{1}{2\langle P^2 \rangle^2} (P^*, BP) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Zum Vergleich der Massenparameter (3.22) und (3.23) wird der folgende Satz über quadratische Formen gebraucht [BB71]:

Satz 1: Sei S eine hermitesche, positiv definite Matrix, welche μ_1 und μ_N als kleinsten und größten Eigenwerte besitzt, dann gilt

$$(x, x)^2 \leq (x, Sx) (x, S^{-1}x) \leq \frac{1}{4} \frac{(\mu_1 + \mu_N)^2}{\mu_1 \mu_N} (x, x)^2. \quad (3.26)$$

Die erste Ungleichung in (3.26) erweist sich als ein trivialer Schluß aus der Schwartzschen Ungleichung. Die zweite ist eine Verallgemeinerung der sogenannten Kantorowitschen Ungleichung. Den Beweis der zweiten Ungleichung in (3.26) kann man in [GR59] finden.

Es sei jetzt angenommen, daß in (3.23) die ATDHF-Zustände benutzt werden. Aus (3.22) und (3.23) und mit Hilfe des Satzes 1 schließt man, daß

$$1 \leq (M_{\text{GCM}}(q_{\text{st}}))^{-1} M_{\text{ATDHF}}(q_{\text{st}}) \leq \frac{1}{4} \frac{(\mu_1 + \mu_N)^2}{\mu_1 \mu_N} \quad (3.27)$$

ist, wobei q_{st} den statischen Punkt bezeichnet, der der Gleichgewichtsdeformation entspricht. In diesem Punkt ist die Stabilitätsmatrix sicher positiv definit.

Die erste Ungleichung in (3.26):

$$M_{\text{GCM}}(q_{\text{st}}) \leq M_{\text{ATDHF}}(q_{\text{st}}) \quad (3.28)$$

ähnelt der Ungleichung (3.8) des Einteilchenbildes (zu beachten ist aber, daß (3.8) für alle Deformationen gilt, während (3.28) auf $q=q_{\text{st}}$ beschränkt ist). Die Tatsache, daß in dem statischen Punkt die GCM-Masse die ATDHF-Masse nicht übersteigen kann, wurde bereits auf andere Weise in der Literatur gezeigt [GLM78].

Das Gleichheitszeichen in (3.28) gilt, wenn der aus den Teilchen-Loch Matrixelementen von P bestehende Spaltenvektor ein Eigenvektor von S ist

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ P^* \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} P \\ P^* \end{pmatrix} . \quad (3.29)$$

Diese Relation kann als eine Verallgemeinerung der in dem Einteilchenbild gültigen Bedingung (3.9) angesehen werden.

Um die Gültigkeit von (3.28) anschaulich einzusehen, kann man bemerken, daß das zeitabhängige Variationsprinzip in dem stationären Fall das zeitunabhängige Variationsprinzip ergibt. Bei der ATDHF-Methode bestimmt das Variationsprinzip die beste, zeitungerade Komponente, die mit dem Ansatz (2.31) für die Wellenfunktion zulässig ist. Bei der TDGCM haben wir kein entsprechendes Variationsverfahren. Die ATDHF-Energie (2.33) ist also eine untere Grenze für die klassische Energie der

GCM (2.37) in dem Gleichgewichtspunkt $q=q_{st}$. Aus diesem Grund ist die ATDHF-Masse (2.36) eine obere Grenze für die GCM-Masse (2.40) für $q=q_{st}$.

Die zweite Ungleichung in (3.27), die als

$$\left. \frac{M_{ATDHF} - M_{GCM}}{M_{ATDHF}} \right|_{q=q_{st}} \leq \left(\frac{\mu_1 - \mu_N}{\mu_1 + \mu_N} \right)^2 \quad (3.30)$$

geschrieben werden kann, setzt einen Maximalwert für die Differenz zwischen den ATDHF- und GCM-Massen fest. Die Größe $(\mu_1 + \mu_N)^2 / 4\mu_1\mu_N$, die die maximale Differenz zwischen den ATDHF- und GCM-Massen bestimmt, ist kleiner als die Konditionszahl der Matrix S μ_N/μ_1 (siehe Ungleichung (8.5) in Anhang 1). Wenn das Gleichungssystem (3.19) gut konditioniert ist, so ist die Konditionszahl klein. Folglich sollte die Differenz zwischen den ATDHF- und GCM-Massen nicht groß sein.

Die Bedingung (3.30) läßt sich leicht in das Einteilchenbild übertragen. Für diesen Fall ist die Matrix S diagonal, und ihre Matrixelementen sind Teilchen-Loch Anregungsenergien. Für alle Werte der kollektiven Koordinate erhält man

$$\left. \frac{M_C - M_E}{M_C} \right|_q \leq \left(\frac{e_1 - e_N}{e_1 + e_N - 2e_0} \right)^2, \quad (3.31)$$

wobei $e_1 - e_0$ und $e_N - e_0$ die kleinsten bzw. die größten Teilchen-Loch Schalenmodellenergien sind.

III.3.2 HF mit Zwangsbedingung (CHF)

Unter Einführung von Summenregeln kann man zwei verschiedene, jedoch äquivalente Ausdrücke für die ATDHF-Masse gewinnen. Läßt man die Selbstkonsistenzbedingung für Q und P fallen, so entstehen unterschiedliche Summenregelformeln, die praktikable Massenparameter darstellen, die aus der ATDHF-Methode resultieren. Diese Formeln kann man auch mit den entsprechenden GCM-Massen vergleichen. In diesem Abschnitt und da wir ein einheitliches Bild der verschiedenen Ausdrücke für den adiabatischen Massenparameter anstreben, führen wir diese Betrachtungen im Detail aus.

Sei F ein beliebiger hermitescher Einteilchenoperator (Symmetrieoperatoren des Hamiltonoperators bzw. deren konjugierte Operatoren sind ausgeschlossen). Summenregeln für diesen Operator haben die Form [BLM79]:

$$(F^* F) (\eta S)^k \eta \begin{pmatrix} F \\ F^* \end{pmatrix} = 2 m_k(F) , \quad k = \pm 1, \pm 3, \dots , \quad (3.32)$$

mit den RPA-Momenten

$$m_k(F) = \sum_n |\langle n | F | 0 \rangle|^2 (E_n - E_0)^k . \quad (3.32a)$$

Der Schwartzschen Ungleichung entsprechend, genügen für $q=q_{st}$ die Momente den Ungleichungen

$$m_{k+2}(F) m_k(F) \geq (m_{k+1}(F))^2 ; \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots . \quad (3.33)$$

Für $q=q_{st}$ ist es sicher, daß S positiv definit ist, und die RPA-Frequenzen reell sind, so daß die Formulierung der Ungleichheiten (3.33) möglich wird. Aus (3.33) kann man noch eine Ungleichung für Energien gewinnen:

$$\mathcal{E}_{k+1} \geq \mathcal{E}_k , \quad \mathcal{E}_{k+1} = \sqrt{\frac{m_{k+2}}{m_k}} , \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots . \quad (3.34)$$

Es entstehen zwei Beziehungen der ATDHF-Masse zu RPA-Momenten. Wendet man einerseits die normale, mit der Energie gewichtete Summenregel zu (3.14) an, so folgt, daß

$$M_{ATDHF}(q_{st}) = \frac{1}{2 m_1(q)} \quad (3.35)$$

ist. Andererseits ergibt die Anwendung der mit der inversen Energie gewichteten Summenregel zu (3.22)

$$M_{ATDHF}(q_{st}) = 2 m_{-1}(P) \quad (3.36)$$

Für selbstkonsistente Lösungen sind (3.35) und (3.36) identisch:

$$m_1(Q) m_{-1}(P) = \frac{1}{4} . \quad (3.37)$$

Im Grenzfall von kollektiven Schwingungen mit kleinen Amplituden stimmt die ATDHF-Theorie mit der RPA überein. Die selbstkonsistent bestimmten P und Q können als lineare Kombinationen von RPA-Bosonen ausgedrückt werden. Ausschöpfung der Summenregeln in Q und P durch einen einzigen angeregten Zustand tritt in diesem Falle auf, und die Gl. (3.37) ist äquivalent zu

$$m_0(Q) m_0(P) = \frac{1}{4} . \quad (3.38)$$

Die Heisenbergsche Unschärfe ist für den RPA-Grundzustand minimal, und dieser Zustand ist somit ein kohärenter Zustand.

Für nichtselbstkonsistente Ansätze für Q und P unterscheidet sich jedoch (3.35) von (3.36). Als Ansatz einer ATDHF-Rechnung nimmt man üblicherweise einen lokalen Operator Q_0 (so e.g. den Quadrupoloperator), der über die Nebenbedingung in die CHF-Gl. eingeführt wird. Man erhält als Approximationen zu dem vollständigen ATDHF-Problem die hydrodynamische, wirbelfreie Masse

$$M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q_M) = \left((Q_0^* \ -Q_0) S \begin{pmatrix} Q_0 \\ -Q_0^* \end{pmatrix} \right)^{-1} = \frac{1}{2 m_1(Q_0)} \quad (3.39)$$

und die selbstkonsistente Cranking-Masse

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_M) = (P_0^* \ P_0) S^{-1} \begin{pmatrix} P_0 \\ P_0^* \end{pmatrix} = 2 m_1(P_0), \quad (3.40)$$

wobei P_0 den zu Q_0 konjugierten Impuls bildet. Die Ausdrücke (3.39) und (3.40) kann man als Iterationen nullter Ordnung bzw. erster Ordnung für die ATDHF-Masse bezeichnen. [Vi77] .

In der Literatur wird der Name "ATDHF-Masse" häufig benutzt, um (3.40) zu bezeichnen, obwohl dabei keine optimierten Zustände berücksichtigt werden (siehe e.g. [GLM78, GQ80]).

Im folgenden wird die Begründung angegeben, warum (3.39) und (3.40) die Bezeichnungen "hydrodynamische, wirbelfreie Masse" bzw. "selbstkonsistente Cranking-Masse" verdienen:

i) "hydrodynamische, wirbelfreie Masse"

Mit dem Ansatz $Q_0 = \sum_i q_0 / \kappa_i$, wobei $q_0 = 2z^2 - x^2 - y^2$ ist, und unter Benutzung der Invarianz des Potentials bezüglich der von Q_0 erzeugenden Transformationen

$$[V, Q_0] = 0$$

erhält man aus (3.39)

$$(M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q_M))^{-1} = \frac{1}{2m} \sum_i \int d^3\vec{\kappa} \varphi_i^* [q_0, [\nabla^2, q_0]] \varphi_i$$

oder, mit Hilfe der Greenschen Formel,

$$= \frac{1}{m} \sum_i \int d^3\vec{\kappa} \varphi_i^* (\vec{\nabla} q_0)^2 \varphi_i = \frac{1}{m} \text{tr}[\rho (\vec{\nabla} q)^2] \quad (3.41)$$

Diese entspricht der kinetischen Energie einer inkompressiblen

$$\vec{\nabla} (\vec{\nabla} q_0) = 0$$

und wirbelfreien Flüssigkeit (siehe [Vi77, GMQ76, GQ80])

$$\vec{\nabla} \wedge (\vec{\nabla} q_0) = 0$$

ii) "selbstkonsistente Cranking-Masse"

Der Ausdruck (3.40) zeigt dieselbe Struktur wie die Cranking-Formel (3.11) auf. Die Formel (3.40) unterscheidet sich jedoch durch die Verwendung der RPA-Ausdrücke für die Matrixelemente bzw. Energien anstelle von einem unkorrelierten Bild

und zusätzlich durch die Verwendung der HF-Basis anstelle von Shalenmodellwellenfunktionen. Für den Gleichgewichtspunkt ist sie identisch mit der sogenannten RPA-Masse mit einer Zwangsbedingung (Constrained RPA, CRPA) [PZS79].

Wir wollen jetzt die Iterationen nullter und erster Ordnung der ATDHF-Masse miteinander vergleichen. Der folgende Satz erlaubt eine Beziehung zwischen (3.39) und (3.40) aufzustellen.

Satz 2: Ist S eine hermitesche, positiv definite Matrix, die μ_1 und μ_N als die kleinsten bzw. die größten Eigenwerte besitzt, so ist dann

$$|(x, y)|^2 \leq (x, Sx)(y, S^{-1}y) \leq \frac{\mu_N}{\mu_1} (x, x)(y, y). \quad (3.42)$$

Die erste Ungleichung folgt aus der Schwartzschen Ungleichung. Ein Beweis der zweiten Ungleichung kann in Anhang 1 gefunden werden.

Geht man mit den Ausdrücken (3.39) und (3.40) in (3.42) ein und benutzt die "schwachen" Vertauschungsrelation zwischen Q_0 und P_0 , so ergibt sich

$$1 \leq \left(M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q_{\text{st}}) \right)^{-1} M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}}) \leq \frac{\mu_N}{\mu_1} 4 \langle Q_0^2 \rangle \langle P_0^2 \rangle. \quad (3.43)$$

Die erste Ungleichung in (3.43):

$$M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q_{\text{st}}) \leq M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}}) \quad (3.44)$$

ergibt die Aussage, daß die hydrodynamische Masse die selbst-konsistente Cranking-Masse nicht überschreiten kann. Gleichheit gilt nur, falls

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_0 \\ Q_0^* \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} P_0 \\ P_0^* \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

Dies erfordert, daß die Ansätze für Q und P bereits den ATDHF-Gleichungen genügen.

Die Ungleichung (3.44) kann noch in die folgende Form

$$m_1(Q_0) m_{-1}(P_0) \geq \frac{1}{4} \quad (3.46)$$

umgeschrieben werden. Dies sieht wie eine mit der Energie gewichtete Unschärferelation aus. Aus (3.38) folgt, daß die selbstkonsistenten Lösungen der ATDHF-Theorie diese Unschärfe minimieren.

Nimmt man an, daß die Koordinate q dem Erwartungswert des Operators Q_0 entspricht, so kann der Ausdruck (3.40), der in (3.43) bzw. (3.44) auftritt, in eine Darstellung mit Q -Momenten gebracht werden. Die Herleitung wird in Anhang 2 vorgestellt. Das Endergebnis lautet:

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}}) = \frac{m_{-3}(Q_0)}{2(m_{-1}(Q_0))^2} \cdot \quad (3.47)$$

Formeln (3.39) und (3.47), die sich beiden auf Q -Momenten beziehen, können mit Hilfe der Ungleichung (3.34) verglichen werden:

$$\frac{M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}})}{M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q_{\text{st}})} = \frac{m_{-3}(Q_0) m_{-1}(Q_0)}{(m_{-1}(Q_0))^2} = \frac{\sum_1^2}{\sum_{-1}^2} \geq 1. \quad (3.48)$$

Dies stimmt mit (3.44) überein. Das Gleichheitszeichen gilt nur, wenn Konzentration der Q -Stärke in einem angeregten Zustand existiert.

Die zweite Ungleichung in (3.43) ergibt eine Aussage über die maximale Abweichung zwischen den zwei erwähnten Iterationen der ATDHF-Masse. Diese maximale Abweichung wird von der Konditionszahl μ_N/μ_1 bestimmt.

Die Größenordnung der Differenz zwischen den beiden ATDHF-Iterationen für die Masse wurde von Giannoni, Quentin und anderen für den Fall von Skyrme-Wechselwirkungen untersucht [GMQ76, GQ80]. Sie kamen zu dem Schluß, daß für kugelsymmetrische Kerne eine gute Übereinstimmung zwischen $M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q_{\text{st}})$ und $M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}})$ besteht, während für Kerne wie C^{12} oder Ni^{56} ,

die keine abgeschlossene Valenzschale besitzen, eine Differenz um einen Faktor 4 auftritt:

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}}) \simeq 4 M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q_{\text{st}}) . \quad (3.49)$$

Für die Beschreibung der isoskalaren Quadrupolriesenresonanz bei sphärischen Kerne erweist sich Q_0 als ein adäquater Ansatz. Daß für den höher angeregten Teil des Energiespektrums eine klassische Näherung wie die Hydrodynamik eine vernünftige Beschreibung liefern kann, entspricht dem Korrespondenzprinzip der Quantenmechanik: der Grenzfall großer Quantenzahlen kann klassisch behandelt werden.

Es kann die Frage gestellt werden, welcher Zusammenhang zwischen den Massenparametern (3.39) bzw. (3.40) und den entsprechenden Massenparameter im Rahmen der GCM besteht. Um diese Frage zu beantworten, bemerken wir, daß die Ungleichungen (3.27) für eine beliebige Parametrisierung der Zustände gelten. Man kann also nicht optimierte Zustände berücksichtigen. Sei $M_{\text{GCM}}^{(1)}$ die Bezeichnung für die GCM-Masse, die CHF-Zustände mit Q_0 als Zwangsoperator benutzt:

$$\left(M_{\text{GCM}}^{(1)}(q) \right)^{-1} = \frac{1}{4 \langle p_0^2 \rangle^2} (p_0^* p_0) S \begin{pmatrix} p_0 \\ p_0^* \end{pmatrix} . \quad (3.50)$$

Dann wird (3.27) durch

$$1 \leq \left(M_{\text{GCM}}^{(1)}(q_{\text{st}}) \right)^{-1} M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}}) \leq \frac{1}{4} \frac{(\mu_1 + \mu_N)^2}{\mu_1 \mu_N} \quad (3.51)$$

ersetzt. Die selbstkonsistente Cranking-Masse ist entweder gleich oder größer als die in der entsprechenden Näherung ausgerechnete GCM-Masse.

Aus der Ungleichung (8.5) (siehe Anhang 1) und aus der Heisenbergschen Unschärferelation für HF-Zustände

$$\langle Q_0^2 \rangle \langle p_0^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \quad (3.52)$$

ist die maximale Abweichung zwischen $M_{GCM}^{(1)}(q_N)$ und $M_{ATDHF}^{(1)}(q_N)$, die in (3.51) ausgedrückt wird, kleiner als die zwischen $M_{ATDHF}^{(0)}(q_N)$ und $M_{ATDHF}^{(1)}(q_N)$.

Es soll betont werden, daß die hydrodynamische Masse keine untere Grenze für die GCM-Masse bildet. Kombiniert man (3.43) und (3.51), so läßt sich eine absolute untere Grenze für die GCM-Masse in dem statischen Punkt finden:

$$M_{GCM}^{(1)}(q_N) \geq 4 \frac{\mu_1 \mu_N}{(\mu_1 + \mu_N)^2} M_{ATDHF}^{(0)}(q_N) . \quad (3.53)$$

Da jedoch

$$4 \mu_1 \mu_N \leq (\mu_1 + \mu_N)^2 \quad (3.54)$$

ist (Ungleichung für das harmonische und arithmetische Mittel [BB71]), erweist sich die Herleitung einer direkten Ungleichung zwischen der GCM-Masse und der hydrodynamischen Masse als unmöglich. Die Differenz soll in praktisch interessanten Fällen untersucht werden. Es ist offenbar, daß, wenn die folgende Proportionalität zwischen P_0 und Q_0 existiert:

$$\begin{pmatrix} P_0 \\ P_0^* \end{pmatrix} = 2i \langle P_0^2 \rangle \begin{pmatrix} Q_0 \\ -Q_0^* \end{pmatrix} , \quad (3.55)$$

dann sind die zwei quadratischen Formen (3.39) und (3.50) identisch. Die Bedingung (3.55) entspricht der Kohärenz der HF-Zustände, da (3.56) die Gleichheit in der Heisenbergschen Relation (3.52) zur Folge hat. In realistischen Situationen erwartet man aber nicht, daß die Unschärfe (3.52) exakt minimiert wird. Dies trifft nur in dem Falle von Modellvorstellungen zu, wie in Abschnitt V.2 diskutiert wird.

Zum Schluß dieses Kapitels, das den Kern dieser Arbeit darstellt, geben wir eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse.

Die ATDHF-Theorie ist eine anspruchsvolle Theorie, für

die wenige praktische Rechnungen vorliegen [RMG80]. Man ist auf Näherungsverfahren angewiesen. Das Cranking-Modell, dem ein Schalenmodell zugrunde liegt, kann als ein Grenzfall des allgemeinen ATDHF-Formalismus angesehen werden. Es liegt nahe, daß man eine ganze Hierarchie von Approximationen für die ATDHF-Masse (3.36) formuliert, unter denen die Cranking-Formel (3.6) die einfachste ist:

1- Selbstkonsistente Cranking-Masse (auch Thouless-Valatin-Masse genannt [TV62], normalerweise in Zusammenhang mit der Diskussion von Rotationen). Die Näherung besteht aus der Annahme, daß die kollektiven Zustände von vornherein (durch die CHF-Methode) vorgegeben werden.

2- Tamm-Dancoff-Cranking-Masse (auch verallgemeinerte Englische Masse genannt [FW70]). Die zusätzliche Näherung gegenüber dem Fall 1) besteht aus der Vernachlässigung der Untermatrix B der Matrix S.

3- HF-Cranking-Masse. Hierbei werden alle Matrixelemente der residualen Wechselwirkung in der Matrix S vernachlässigt. Eine Variante ergibt sich, wenn nur die diagonalen Matrixelemente der residualen Wechselwirkung berücksichtigt werden. Man erhält dann eine Formel, die auch als Thouless-Valatin-Formel genannt wurde [Ro70, Wo75].

4- Englische Cranking-Masse. Diese benutzt ein Schalenmodell und ist deswegen ein grober Ersatz für 3). Es ist zu bemerken, daß oft der Name "Englische Cranking-Masse" auch für die HF-Cranking-Masse verwendet wird (e.g. in [By78, GQ80]). Um Verwirrungen zu vermeiden, haben wir unterschiedliche Bezeichnungen benutzt.

Es ist weiterhin durchaus möglich, daß man die Formel (3.35) für die ATDHF-Masse als Ansatz benutzt. Auf diese Art und Weise entsteht auch eine Näherungshierarchie. Die dazugehörigen Massenformeln können mit den Formeln 1 bis 4 verglichen werden.

Ist der Ausgangspunkt die GCM-Masse mit optimierten Zuständen (3.23), kann gleichfalls eine Reihe von entsprechenden Näherungen formuliert werden. Direkte Vergleiche mit den betreffenden Formeln, die aus (3.36) gewonnen werden, sind durchführbar. Die Englische Cranking-Masse 4) wurde in Abschnitt II.3.2 vorgestellt und in

Abschnitt III.2 mit der entsprechenden, aus der GCM resultierenden Masse verglichen. Ebenso kann man die HF-Cranking-Masse behandeln. Die selbstkonsistente Cranking-Masse wurde in diesem Abschnitt mit der entsprechenden GCM-Masse verglichen. Unter Benutzung der selben Techniken kann man mit der Tamm-Dancoff-Cranking-Masse umgehen.

Die Betrachtung der auf den Näherungen 1) und 2) basierend Massen mit Hilfe von Ungleichungen muß auf den statischen Punkt beschränkt werden, während sie für die auf den Näherungen 4) und 5) basierenden Massen für alle Deformationen gültig ist.

IV Die GCM-Nullpunktsenergien

Die Notwendigkeit der ZPE-Korrekturen für kollektiven Potentiale wird in der Literatur über Spaltung und Schwerionenstreuung ausführlich diskutiert [Re75, Re76, Re78, GG79, BC80, UGR81]. Ausdrücke für die sowohl kinetische als auch potentielle ZPE erhält man in der GCM mit Hilfe der GOA (siehe Gl.(2.28c)).

Üblicherweise wird nur die kinetische ZPE, in die die Cranking-Masse eingeliefert wird, berücksichtigt. Dieser Teil der ZPE vermittelt einen Zusammenhang zwischen statischen und dynamischen Aspekten in kollektiven Bewegungen. Für Translationen und Rotationen verschwindet die potentielle ZPE. Sie existiert aber für andere kollektive Moden, wie e. g. Schwingungen und Spaltung. Deshalb soll ihre Größenordnung abgeschätzt werden. Im folgende wird eine allgemeine Interpretation der gesamten ZPE vorgestellt. Es wird gezeigt, daß bei Schwingungsmoden der Einfluß des potentiellen Anteils der ZPE auf die kollektive Potentialenergiefläche in dem statischen Punkt bedeutend ist. Bei dieser Diskussion setzen wir voraus, daß die erzeugenden Zustände CHF-Lösungen eines Vielteilchen-Hamiltonoperators sind.

Da die kinetische und potentielle ZPE proportional zum Erwartungswert eines Doppelantikommutators

$$E_{KZPE}^{GCM}(q) = \frac{\langle P^2 \rangle}{2M_{GCM}(q)} = \frac{1}{4\langle P^2 \rangle} (\langle P\bar{H}P \rangle + \langle \bar{H}P^2 \rangle) \quad (4.1)$$

bzw. eines Doppelkommutators ist,

$$E_{PZPE}^{GCM}(q) = \frac{1}{8\langle P^2 \rangle} \frac{d^2}{dq^2} \langle H \rangle = \frac{1}{4\langle P^2 \rangle} (\langle P\bar{H}P \rangle - \langle \bar{H}P^2 \rangle) \quad (4.2)$$

beträgt die gesamte ZPE die Hälfte der Anregungsenergie:

$$E_{ZPE}(q) = E_{KZPE}^{GCM}(q) + E_{PZPE}^{GCM}(q) = \frac{1}{2} \frac{\langle P\bar{H}P \rangle}{\langle P^2 \rangle} \quad (4.3)$$

Dieses Ergebnis ist eine Erweiterung der entsprechenden Formel für die ZPE des quantenmechanischen, harmonischen Oszillators.

Gl. (4.3) gilt für alle Deformationen und nicht nur für den Grenzfall kleiner Amplituden. Es soll noch an dieser Stelle bemerkt werden, daß der Hamiltonoperator in Gl.(4.2) nicht durch einen Schalenmodell-Hamiltonoperator ersetzt werden kann.

In Grenzfall sehr enger Wellenpakete $|q\rangle$, für der sich der Gaußsche Überlapp einer δ -Funktion nähert, geht die gesamte ZPE gegen Null:

$$E_{ZPE}(q) \rightarrow 0,$$

da

$$\langle Q^2 \rangle \rightarrow 0, \quad \langle P^2 \rangle \rightarrow \infty$$

Die Differenz zwischen beiden GCM-ZPE beträgt die Hälfte der "Korrelationsenergie" :

$$E_{KZPE}^{GCM}(q) - E_{PZPE}(q) = \frac{1}{2} \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{\langle P^2 \rangle} \quad (4.4)$$

Die kinetische ZPE ist größer (kleiner) als die potentielle ZPE für einen positiven (negativen) Korrelationskoeffizienten von H und P^2 . In dem Gleichgewichtspunkt erwartet man eine kleine Korrelation, da die Zustände Variationsnäherungen von Eigenzuständen von H sind. Deshalb sind die kinetische und potentielle ZPE der GCM in diesem Punkt annähernd gleich. Wegen der Q -Abhängigkeit der CHF-Zustände kann man für große Deformationen keine Aussage über die Größenordnung des Korrelationskoeffizienten machen.

Man kann auch eine kinetische ZPE ansetzen, in der die GCM-Masse durch die ATDHF-Masse ersetzt wird. In diesem Falle gilt die oben erwähnte Interpretation der gesamten ZPE nicht mehr. Unter bestimmten Voraussetzungen findet man jedoch eine Relation zwischen den beiden ZPE-Termen. Führt man RPA-Zustände statt der oben verwandten HF-Zustände ein und benutzt die Quasibosonennäherung, so erhält man für $q=q_{st}$:

$$E_{KZPE}^{ATDHF}(q_{st}) = \frac{m_0(P)}{4 m_1(P)} \quad , \quad (4.5)$$

$$E_{\text{PZPE}}(q_{\text{st}}) = \frac{m_1(P)}{4 m_0(P)} . \quad (4.6)$$

(4.5) und (4.6) können unmittelbar mit Hilfe von (3.33) verglichen werden:

$$E_{\text{KZPE}}^{\text{ATDHF}}(q_{\text{st}}) \leq E_{\text{PZPE}}(q_{\text{st}}) . \quad (4.7)$$

Gleichheit gilt für den Fall, daß die P-Stärke in einem einzigen Zustand konzentriert ist. Dies ist tatsächlich der Fall für die RPA, wie in Abschnitt III.3 diskutiert wurde:

$$E_{\text{KZPE}}^{\text{ATDHF}}(q_{\text{st}}) = E_{\text{PZPE}}(q_{\text{st}}) = \frac{1}{4} \bar{E} , \quad (4.8)$$

wobei $\bar{E}$ eine mittlere Anregungsenergie ist.

Dieses Resultat ist anschaulich verständlich, da bei dem quantenmechanischen, harmonischen Oszillator eine Gleichverteilung der ZPE in kinetischem und potentielltem Anteil existiert, und die kollektiven Schwingungen mit kleinen Amplituden harmonisch sind.

V. Anwendungen

V.1 Kollektive Bewegungen, die einer Symmetrie entsprechen

Wir greifen an dieser Stelle die Frage von Symmetrioperationen auf, die im Rahmen der Diskussion von kollektiven Massenparameterneine besondere Rolle spielen.

Die Diskussion des Vielteilchensystems der Kernphysik basiert im allgemeinen auf Lösungsansätzen, die es erlauben, die Symmetrie des vorgegebenen Hamiltonoperators zu brechen. Nur in besonderen Fällen, wie e.g. bei der RPA, ist es möglich, die Symmetriemoden sauber abzutrennen [Th61, LM80].

Für Translationen sind die optimierten kollektiven Operatoren Q und P bekannt : Q ist eine Komponente der Schwerpunktskoordinate und P ist die entsprechende Komponente des gesamten Impulses. Die Galileische Invarianz des Vielteilchen-Hamiltonoperators

$$[H, \vec{R}] = -i \frac{\vec{P}}{mA} \quad (5.1)$$

wird in der ATDHF-Gl.(3.18) ausgedrückt. Die Ausdrücke (3.14) und (3.22) sind somit identisch für den Fall von Translationen.

Für Rotationen ist lediglich P bekannt : P ist eine Komponente des gesamten Drehimpulses J . Der zu P konjugierte Operator Q ist nicht einfach definierbar [Pe79]. Setzt man in den Ausdruck (3.22) für P die Drehimpulskomponente J_x ein, so erhält man das selbstkonsistente Cranking-Trägheitsmoment, auch Thouless-Valatin Trägheitsmoment genannt.

Mit der Übertragung der in . Kapitel III dargestellten Formeln für kollektive Bewegungen, die einer Symmetrioperation entsprechen, muß man sehr vorsichtig umgehen. Die Gründe sind mannigfaltig. Auf der einen Seite existiert kein Minimalpunkt der potentiellen Energie als Funktion der kollektiven Koordinate (Schwerpunktsp position oder Orientierung des Kerns im Raum). Auf der anderen Seite entstehen Schwierigkeiten bei der Anwendung von Summenregeln.

Aus den folgenden Argumenten ergibt sich die Tatsache, daß die Summenregeln modifiziert werden müssen. Im Rahmen der RPA

stellt man fest: [Th61, LM80]

i) Teilchen-Loch Anregungen, die mit Hilfe von Symmetrieeoperatoren konstruiert werden, so e.g.

$$|P\rangle = \sum_{ph} (P_{ph} a_p^\dagger a_h + P_{ph}^* a_h^\dagger a_p) |RPA\rangle \quad (5.2)$$

sind Vektoren, die orthogonal zu allen anderen RPA-Eigenzuständen außer $|Q\rangle$ sind. Man nennt $|P\rangle$ einen "spuriösen" Zustand.

ii) Der Zustand $|P\rangle$ ist nicht normierbar wie die üblichen RPA-Zustände

$$\langle P|P\rangle \neq 1. \quad (5.3)$$

In der Ableitung der Summenregeln (3,32) benutzt man die Vollständigkeitsrelation in dem Raum der nicht "spuriösen" RPA-Zustände. Da jedoch $|P\rangle$ außerhalb dieses Raumes ist, muß er bei der Diskussion von Symmetrioperationen zusätzlich berücksichtigt werden. Für die mit der Energie gewichtete Summenregel ergibt sich beispielsweise [LM80]:

$$\sum_n \langle n|F|0\rangle E_n = \langle [F, [H, F]] \rangle - \frac{1}{Z_m A} \sum_i \langle [P_i, F] \rangle. \quad (5.4)$$

Die Matrixelemente von e.g. P_x zwischen dem RPA-Grundzustand und den angeregten Zuständen verschwinden

$$\langle n|P_x|0\rangle = 0, \quad \forall_n. \quad (5.5)$$

Die Cranking-Formel mit RPA-Zuständen ergibt deshalb eine verschwindende Masse. Dies ist ein allgemeines Paradoxon, das mit der Cranking-Formel verbunden ist: Die Massenformel ergibt Null für Zustände, die die Symmetrien des Hamiltonoperators wiedergeben. Sie ist nur brauchbar für genäherte Zustände. [Ro70, Wo75].

Gewöhnlich erfolgt die Approximation, indem man die Restwechselwirkung ignoriert. Man gelangt somit zu der HF-Cranking-

Masse (siehe Abschnitt III.3.2), die Cranking-Formel im Rahmen der HF-Theorie ergibt jedoch im allgemeinen ein inkorrektes Ergebnis für Translationen. Der Grund liegt in der Nichtlokalität des HF-Potentials. Das Trägheitsmoment in der HF-Cranking-Näherung scheint für leichtere Kerne, die keine supraleitenden Eigenschaften aufzeigen, richtig zu sein [KL64].

Verwendet man statt HF-Zustände Schalenmodellzustände in der Cranking-Formel, so gelangt man zu der Inglisschen Cranking-Masse. Im Falle von Translationen ergibt diese die korrekte Masse, da das Schalenmodellpotential lokal ist, und deswegen in dem Schalenmodell die Galileische Invarianzbedingung (5.1) erfüllt wird. Unter Benutzung von Nilssonschen Schalenmodellzuständen erhält man Cranking-Trägheitsmomente deformierter Kerne, die um einen Faktor 2 größer sind als die experimentellen Werte. Die Inglissche Cranking-Formel führt zu einem akzeptablen Ergebnis nur unter Berücksichtigung der Paarung im Rahmen der BCS-Näherung [Ro70].

Die obige Diskussion macht deutlich, daß die Massenparameter für Translationen und Rotationen anscheinend nicht mit derselben, in einem Einteilchenbild fundierten Formel beschrieben werden können. Die Gültigkeitsbedingung der Cranking-Formel soll im allgemeinen Rahmen der GCM oder ATDHF-Methode untersucht werden, in welchen die Restwechselwirkung in Betracht gezogen wird.

Die GCM verdeutlicht die hier erwähnten Probleme. Die GCM-Formel erlaubt keine Darstellung durch RPA-Momente. Benutzt man zur Auswertung der Formel Zustände mit den korrekten Symmetrieeigenschaften, so verschwinden Zähler und Nenner. Die GCM-Formel ergibt also für "gute" Zustände einen unbestimmten Wert statt Null.

Die GCM-Masse bietet den Vorteil, daß die zwei Blöcke der RPA-Matrix S separiert werden können:

$$M_{GCM}^{-1} = \frac{\langle P (\bar{H}_{HF} + V_{res}) P \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2} + \frac{\langle V_{res} P^2 \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2} \quad (5.6)$$

Für die ATDHF-Masse dagegen ist diese Separation nicht möglich.

Die zwei Terme auf der rechten Seite der Gl.(5.6), die wir Anregungs- bzw. Korrelationsterme genannt haben, sind für Symmetrioperationen identisch, wie schon in Abschnitt III.1 bemerkt wurde. In diesem Falle ist der Ausdruck

$$M_{GCM}^{-1} = \frac{\langle P \bar{H}_{HF} P \rangle}{2 \langle P^2 \rangle^2}, \quad (5.7)$$

der der HF-Cranking-Formel entspricht (siehe Abschnitt III.2) mit $V_{res} = 0$ nicht gerechtfertigt: Aus $V_{res} = 0$ folgt, daß die zwei Terme in (5.6) verschieden sind.

Die Formel (5.7) ist allerdings vertretbar, wenn sich die Beiträge $\langle P V_{res} P \rangle$ und $\langle V_{res} P^2 \rangle$ nahezu aufheben:

$$\langle P V_{res} P \rangle \simeq - \langle V_{res} P^2 \rangle \quad (5.8)$$

Für Translationen gilt dies nicht, da das HF-Potential im allgemeinen nicht lokal ist (e.g. das HF-Potential, das man mit Skyrme-Wechselwirkungen erhält). Die experimentelle Angabe, daß die HF-Cranking-Masse für Rotationen leichter Kerne sich gut bewährt, legt nahe, daß in diesen Fällen (5.8) gültig ist.

Man kann den einfacheren Fall eines Schalenmodells auch diskutieren. Bei der Anwendungen der GCM auf Symmetrien muß man beachten, daß die Ersetzung von H durch einen Schalenmodellansatz H_{SM} zweideutig ist. Ersetzt man H durch H_{SM} in (3.1), so kommt tatsächlich das Ergebnis (3.7) heraus. Ersetzt man aber H durch H_{SM} in der Peierls-Yoccoz-Formel

$$M_{PY}^{-1} = \frac{\langle P \bar{H} P \rangle}{\langle P^2 \rangle^2}, \quad (5.9)$$

so erhält man eine Masse

$$M_{PY}^{-1} = \frac{\langle P \bar{H}_{SM} P \rangle}{\langle P^2 \rangle^2} \quad (5.10)$$

die um einen Faktor 2 kleiner ist als die Inglissche Cranking-Masse :

$$M_{\text{py}} \leq \frac{1}{2} M_C \quad (5.11)$$

Die Differenz ist verständlich, da H_{SM} die Translations- und eventuell die Rotationssymmetrie verletzt. Das Ergebnis (3. 7) kann eine vernünftige Näherung für Translationen bilden. Für das harmonische Schalenmodell fällt (3.7) mit dem Cranking-Ergebnis (3.6) zusammen, da $P |0\rangle$ ein Eigenzustand von H_{SM} ist (siehe Gl.(3.9)) [PY57]. Für Rotationen scheint, daß (5.10.) geeigneter als (3.7) ist [WTT68]. Diese Diskussion macht klar, warum eine Diskrepanz um einen Faktor 2 zwischen den Berechnungen des Trägheitsmoments mit einer Projektionsformel und der Inglisschen Cranking-Formel aufgetreten ist [Wo75] .

V.2 Schwingungen. Untersuchung an einfachen Modellen

In diesem Abschnitt befassen wir uns damit, an Hand einfacher Modelle den in den Kapiteln III und IV vorgestellten Formalismus für den Fall kollektiver Schwingungen zu untersuchen. Der Zusammenhang zwischen den aus der GCM und ATDHF-Theorie resultierenden Ausdrücken wird für jedes Beispiel diskutiert.

Die folgende Beispiele bieten sich für diese Diskussion an :

- 1) Anisotroper harmonischer Oszillator
- 2) Lipkin-Modell
- 3) Quadrupol-Quadrupol-Modell

V.2.1 Anisotroper harmonischer Oszillator

In der Literatur wurde gezeigt (siehe [Wi64, MN78]) , daß für das Nilssonsche Modell ohne Spin-Bahn-Terme die Cranking-Masse und die hydrodynamische Masse für eine kugelförmige Dichteverteilung gleich sind. Ein wichtiger Punkt in der Ableitung dieses Resultates ist die Förderung von Selbstkonsistenz in der Form : Potential und Dichte müssen in ihrer Geometrie übereinstimmen.

Die kollektive Koordinate ist in diesem Modell die Deformation β . Der Impulsoperator $P = i \frac{\partial}{\partial \beta}$ besitzt nur in dem statischen Punkt $\beta = 0$ nichtverschwindende Matrixelemente zwischen Zuständen, die sich in zwei Energiequanten $\Delta E = 2\hbar\omega$ unterscheiden. Daraus folgt, daß die Relation (3.9) für $\beta = 0$ automatisch erfüllt wird:

$$\begin{aligned} H_{SM}(\beta=0) \left(\sum_{mi} P_{mi} a_m^\dagger a_i |0\rangle \right) &= \sum_{mi} P_{mi} (\epsilon_m - \epsilon_i) a_m^\dagger a_i |0\rangle = \\ &= \Delta E \left(\sum_{mi} P_{mi} a_m^\dagger a_i |0\rangle \right) \end{aligned} \quad (5.12)$$

und deshalb die GCM-Masse mit der Cranking-Masse (bzw. der hydrodynamischen Masse) übereinstimmt:

$$M_{GCM}(\beta=0) = M_C(\beta=0) = M_h(\beta=0) = \frac{3}{8\pi} m A R_0^2$$

(5.13)

mit

$$R_0^2 = \frac{5}{3} \langle r^2 \rangle = \frac{5}{3} (1.2 \cdot A^{1/3})^2 \text{ fm}^2. \quad (5.14)$$

Das Beispiel deutet an, daß die Entartung der durch P verknüpften Niveaus eine hinreichende Bedingung für die Gleichheit zwischen Cranking- und GCM-Masse ist: $\Delta E = \epsilon_m - \epsilon_i$ mit $P_{mi} \neq 0$.

Die Masse (5.13) ist selbstverständlich größer als die reduzierte Masse des Systems:

$$M_{\text{GCM}} (\beta=0) > \mu = \frac{A}{4}, \quad \frac{V}{A} \quad (5.15)$$

V.2.2 Das Lipkin-Modell

Das Lipkin-Modell ist ein einfaches Modells, das in verschiedenen Formen zur Erprobung von kollektiven Theorien eingesetzt wurde [LMG65, ALM66, PUF71, FC72, Ho73]. Es beschreibt ein System von N-Fermionen, die auf zwei Niveaus mit dem Energieunterschied ϵ verteilt werden. Die Wechselwirkung hat Monopolcharakter: sie streut Teilchenpaare zwischen den Niveaus, ohne daß sich die "magnetischen" Quantenzahlen ändern.

Der Hamiltonoperator lautet:

$$H = \frac{1}{2} \epsilon \sum_{h=1, \dots, N} \sum_{\lambda=\pm 1} \lambda a_{h\lambda}^+ a_{h\lambda} + \frac{V}{2} \sum_{hh' \lambda \lambda'} a_{h\lambda}^+ a_{h'\lambda'}^+ a_{h'-\lambda'} a_{h-\lambda}. \quad (5.16)$$

Setzt man die folgende Operatoren an

$$\begin{aligned} J_{\pm} &= \sum_h a_{h\pm 1}^+ a_{h\mp 1} \\ J_z &= \frac{1}{2} \sum_{h\lambda} \lambda a_{h\lambda}^+ a_{h\lambda}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

die den Kommutatorrelationen des Drehimpulses genügen, so folgt, daß der Hamiltonoperator (5.16) als ein Polynom in den SU(2)-Generatoren umgeschrieben werden kann:

$$H = \epsilon J_z + \frac{1}{2} V (J_+^2 + J_-^2) . \quad (5.18)$$

Der Grundzustand, der dem ersten Term von (5.18) entspricht, ist $|J, J_z = J\rangle = |\frac{N}{2}, -\frac{N}{2}\rangle$. Er ist von Zuständen mit anderen J -Werten entkoppelt.

Im allgemeinen verwendet man bei der Diskussion des Lipkin-Modells spinkohärente Zustände (auch atomare kohärente Zustände genannt [PUF71, FC72, Ho73], die den kohärenten Zuständen des harmonischen Oszillators ähnlich sind [Pe77]:

$$|\alpha\rangle = (1 + |\alpha|^2)^{-J} e^{\alpha J_+} |J, -J\rangle . \quad (5.19)$$

Mit $\alpha = \operatorname{tg} \frac{\varphi}{2}$ (hierbei nimmt man an, daß α reell ist) und unter Einführung der Notation $|0\rangle = |J, -J\rangle$, kann man (5.19) in folgender Form schreiben

$$|\varphi\rangle = \left(\cos \frac{\varphi}{2}\right)^N e^{\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} J_+} |0\rangle . \quad (5.20)$$

Die kollektive Koordinate ist also α bzw. φ .

Der Energieerwartungswert des Hamiltonoperators (5.18) bezüglich der spinkohärenten Zustände lautet

$$\langle \alpha | H | \alpha \rangle = -\frac{\epsilon N}{2} \frac{1 - |\alpha|^2}{1 + |\alpha|^2} - \frac{VN}{2} (1 - N) \frac{\alpha^2 + \alpha^{*2}}{(1 + |\alpha|^2)^2} \quad (5.21)$$

bzw., mit $\gamma = \frac{V}{\epsilon} (1 - N)$ (γ ist ein positiver Parameter, da V negativ ist)

$$\langle \varphi | H | \varphi \rangle = -\frac{\epsilon N}{2} \left(\cos \varphi + \frac{\gamma}{2} \sin^2 \varphi \right) . \quad (5.22)$$

Die Minimierung des Erwartungswertes (5.21) bzw. (5.22) bestimmt den statischen Punkt:

$$\alpha^2 = 0, \quad 0 \leq \chi \leq 1 \quad (5.23)$$

$$\alpha^2 = \frac{\chi-1}{\chi+1}, \quad \chi > 1$$

oder

$$\varphi = 0, \quad 0 \leq \chi \leq 1 \quad (5.24)$$

$$\varphi = \arccos \frac{1}{\chi}, \quad \chi > 1.$$

Man beobachtet einen Phasenübergang, der von χ abhängt. Der "sphärische" HF-Zustand geht in einen "deformierten" Zustand über.

Die Korrelations- bzw Anregungsbeiträge zu der GCM-Masse sind

$$A(\varphi) = \frac{\langle \bar{P} H P \rangle}{\langle P^2 \rangle} = \epsilon \left(\cos \varphi + \frac{3}{2} \chi \sin^2 \varphi \right), \quad (5.25)$$

$$B(\varphi) = \frac{\langle \bar{H} P^2 \rangle}{\langle P^2 \rangle} = \epsilon \chi \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \varphi \right). \quad (5.26)$$

Sie werden in Abb. 1 dargestellt.

Die GCM-Masse stimmt mit der ATDHF-Masse überein [FC72, Ho73]:

$$M_{GCM}^{-1}(\varphi) = M_{ATDHF}^{-1}(\varphi) = \frac{2\epsilon}{N} \left[\cos \varphi + \chi (1 + \sin^2 \varphi) \right] \quad (5.27)$$

Die Gleichheit in dem statischen Punkt ist ein Beispiel für die Gültigkeit der Relation (3.29).

Korrekturen zu der GOA wurden bereits in der Literatur diskutiert (e.g. [Ba80]). Es stellte sich heraus, daß diese Korrekturen für schwere Systeme unbedeutend sind.

Die in Abschnitt III.3.2 angesprochene Hierarchie von Näherungen für die GCM-ATDHF-Masse (5.27) schließt folgende Formeln ein (hierzu Abb. 2 und 3 für $\chi=0.8$ bzw. $\chi=1.8$):

$$M_{TDC}^{-1}(\varphi) = \frac{2\epsilon}{N} (\cos\varphi + \frac{3}{2} \kappa \sin^2\varphi) \quad , \quad (5.28)$$

$$M_{HFC}^{-1}(\varphi) = \frac{2\epsilon}{N} (\cos\varphi + \kappa \sin^2\varphi) \quad (5.29)$$

$$M_{IC}^{-1}(\varphi) = \frac{2\epsilon}{N} \cos\varphi \quad (5.30)$$

Sie genügen den Ungleichungen :

$$M_{IC}(\varphi) \geq M_{HFC}(\varphi) \geq M_{TDC}(\varphi) \geq M_{GCM}(\varphi) \quad (5.31)$$

Die Differenz zwischen der GCM-ATDHF-Masse und der HF-Cranking-Masse ist besonders interessant. In dem statischen Punkt erhält man (siehe Abb. 4) :

$$\Delta(\varphi=0) = \frac{M_{HFC} - M_{GCM}}{M_{HFC}} = \frac{\kappa}{1+\kappa} \quad , \quad 0 \leq \kappa \leq 1, \quad (5.32)$$

$$\Delta(\varphi = \arccos \frac{1}{\kappa}) = \frac{1}{2} \quad , \quad \kappa > 1. \quad (5.33)$$

Die relative Abweichung beträgt maximal 50%.

Die kinetische und potentielle ZPE der GCM sind

$$E_{KZPE}(\varphi) = \frac{\langle p^2 \rangle}{2 M_{GCM}(\varphi)} = \frac{\epsilon}{4} [\cos\varphi + \kappa(1 + \sin^2\varphi)] \quad , \quad (5.34)$$

$$E_{PZPE}(\varphi) = \frac{1}{8 \langle p^2 \rangle} \frac{d^2}{dq^2} \langle H \rangle = \frac{\epsilon}{4} [\cos\varphi - \kappa(1 - 2\sin^2\varphi)] \quad (5.35)$$

Hieraus ergibt sich für die gesamte ZPE :

$$E_{ZPE}(\varphi) = E_{KZPE} + E_{PZPE} = \frac{A}{2} = \frac{\epsilon}{2} (\cos\varphi + \frac{3}{2} \sin^2\varphi) \quad (5.36)$$

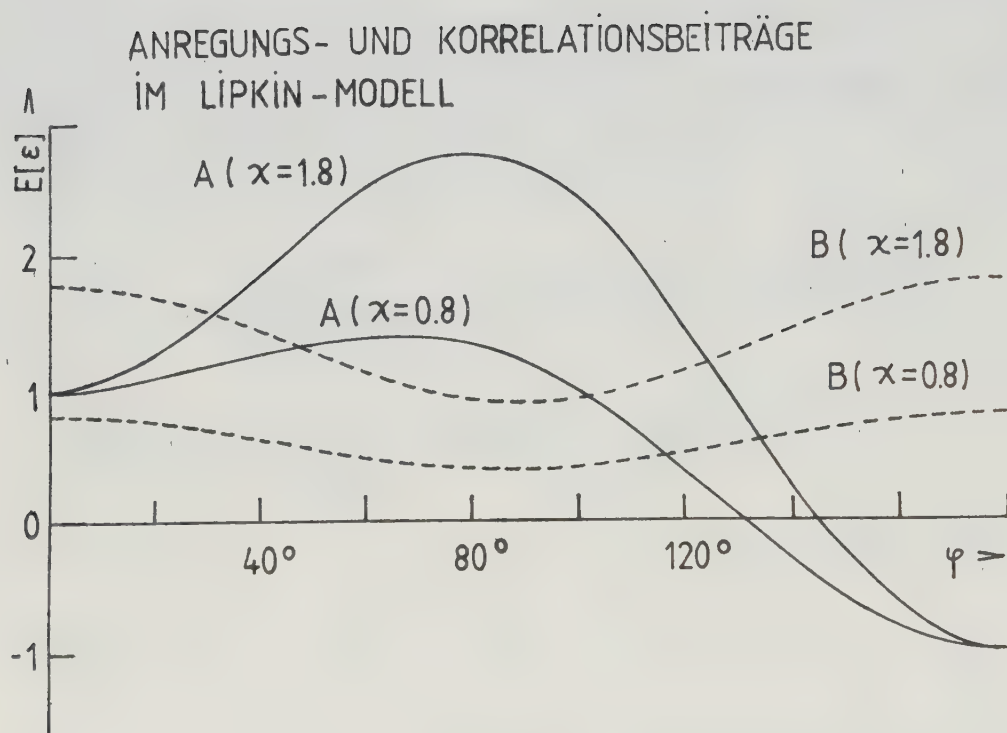


Abb.1

Anregungs- (A, ———) und Korrelationsbeiträge
(B, - - - - -) zu der GCM-Masse im Lipkin-Modell
als Funktion der Koordinaten φ ($\chi=0.8, \chi=1.8$)

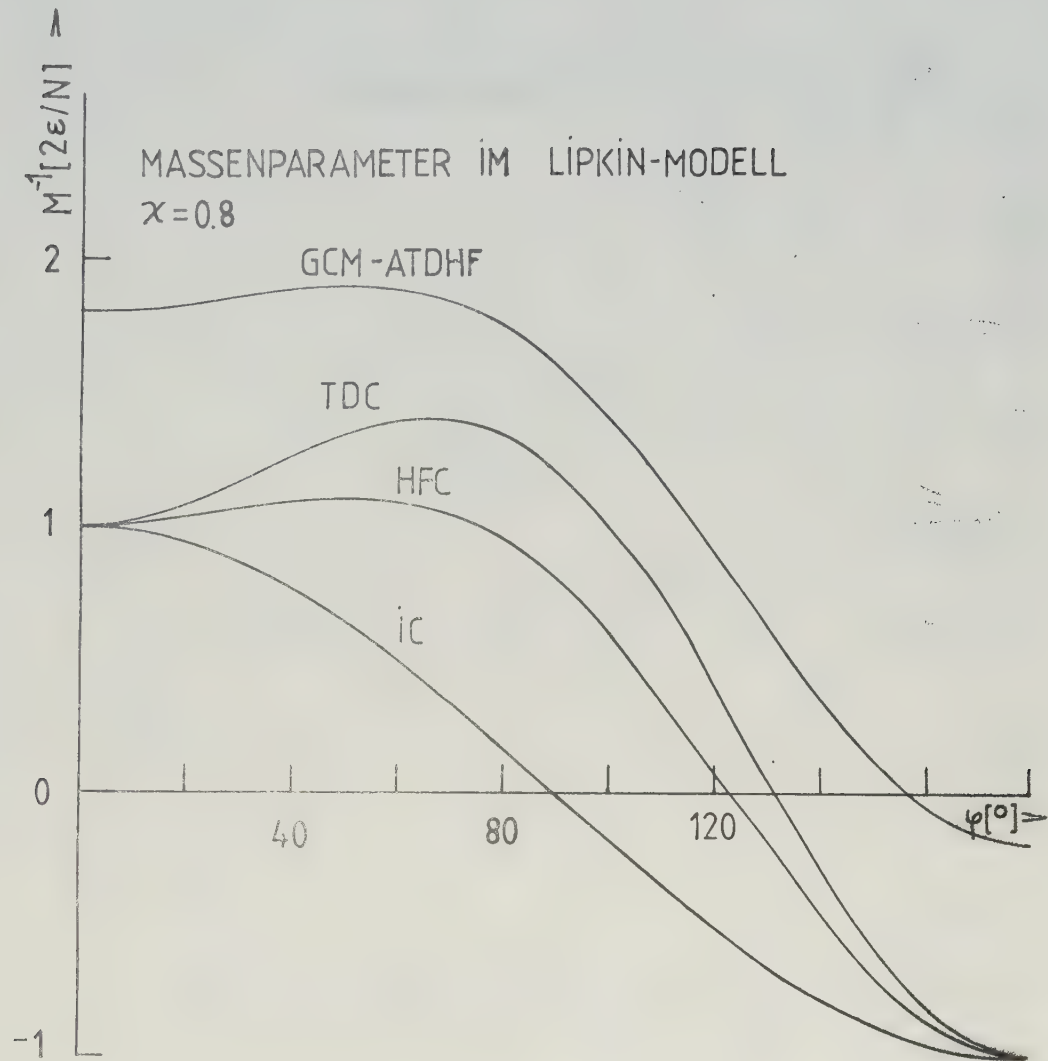


Abb.2

Die GCM-ATDHF-Masse im Lipkin-Modell und ihre TDC-, HFC-, und IC-Näherungen ($\chi = 0.8$)

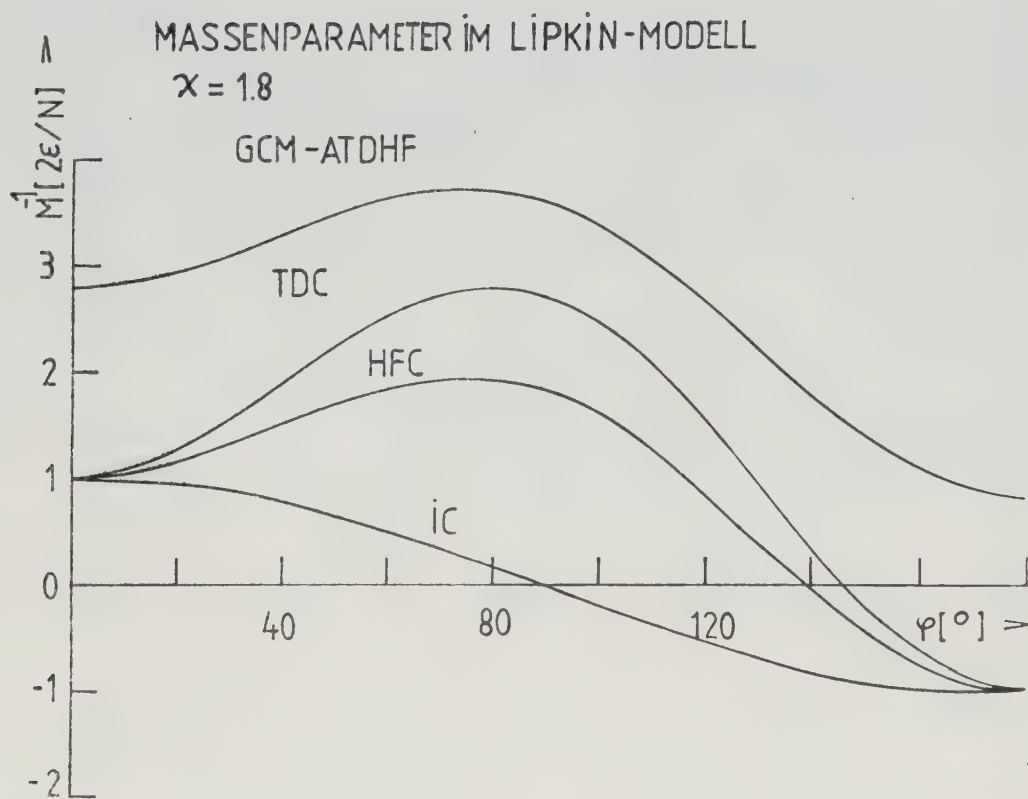


Abb.3

Die GCM-ATDHF-Masse im Lipkin-Modell und ihre TDC-, HFC-, und IC Näherungen ($\chi = 1.8$)

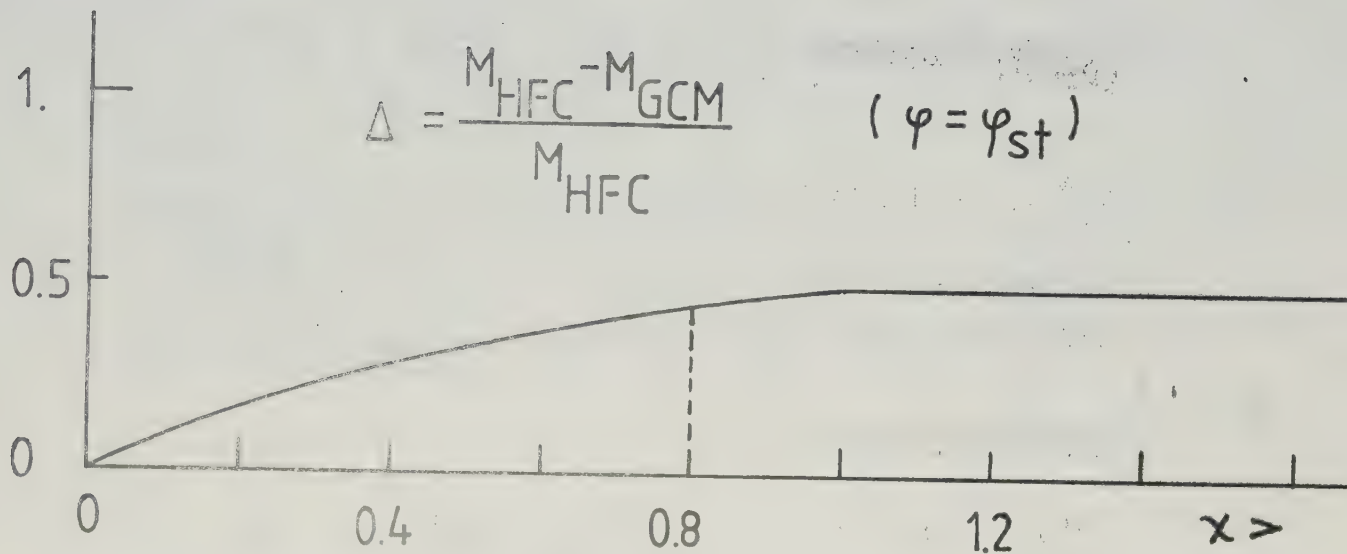


Abb. 4

Relative Abweichung zwischen der GCM-ATDHF-Masse und der HF-Cranking-Masse beim Lipkin-Modell in dem statischen Punkt als Funktion von χ .

Die Abb.5 zeigt diese ZPE-Beiträge zu der Potentialenergiekurve(5.22). Für die Differenz zwischen der kinetischen und der potentiellen ZPE erhält man:

$$\Delta E_{\text{ZPE}}(\varphi) = E_{\text{KZPE}} - E_{\text{PZPE}} = \frac{B}{2} = \frac{\epsilon\gamma}{2} \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \varphi\right) \geq 0. \quad (5.36)$$

Die kinetische ZPE ist immer größer als die potentielle ZPE. Untersucht man die Größenordnung der Differenz in dem statischen Punkt, erhält man vor dem Phasenübergang

$$\Delta E_{\text{ZPE}}(\varphi=0) = \frac{\epsilon\gamma}{2}, \quad 0 \leq \gamma \leq 1, \quad (5.37)$$

und nach dem Phasenübergang

$$\Delta E_{\text{ZPE}}\left(\varphi = \arccos \frac{1}{\gamma}\right) = \frac{\epsilon\gamma}{4} \frac{\gamma^2 + 1}{\gamma^2}, \quad \gamma > 1 \quad (5.38)$$

(siehe Abb.6). In dem Gleichgewichtspunkt ist der Beitrag der potentiellen ZPE größer für "sphärische" Kerne ($0 \leq \gamma \leq 1$) als für "deformierte" Kerne ($\gamma > 1$). Für kleine γ -Werte ist die potentielle ZPE vergleichbar mit der kinetischen ZPE.

V.2.3 Quadrupol-Quadrupol-Modell

Bei dem Quadrupol-Quadrupol-Modell ergänzt man ein Einteilchenanteil des Hamiltonoperators (Schalenmodell, HF-Modell) mit einer Quadrupolwechselwirkung.

Die Matrixelemente der Wechselwirkung sind gegeben durch

$$V_{ph, h'p'} = \mu Q_{ph} Q_{p'h'}^* \quad (5.39)$$

worin Q_{ph} : Matrixelemente des Quadrupoloperators Q sind. Austauschsterme werden vernachlässigt.

Da sich bei der Berechnung von quadratischen Formen mit der Stabilitätsmatrix S die Restwechselwirkungsanteile sich aufheben, besteht kein Unterschied zwischen RPA und HF-Momenten [BV78]. Die ATDHF-Masse stimmt also mit ihrer

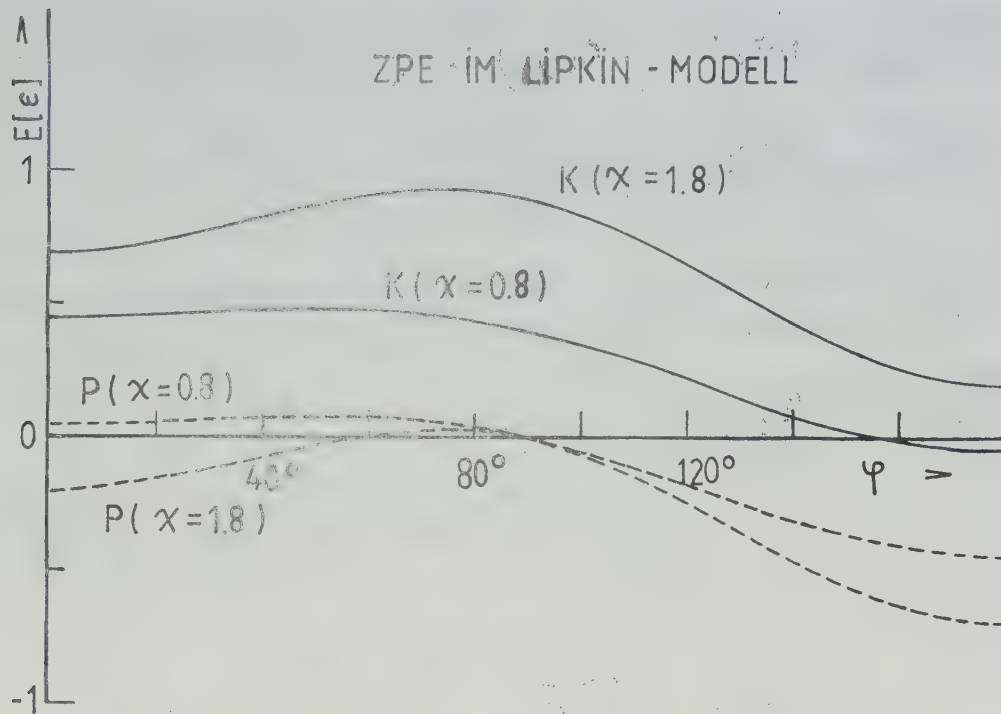


Abb.5

Kinetische (K, —) und potentielle (P, ----) Nullpunktsenergien im Fall des Lipkin-Modells ($\chi=0.8, \chi=1.8$)

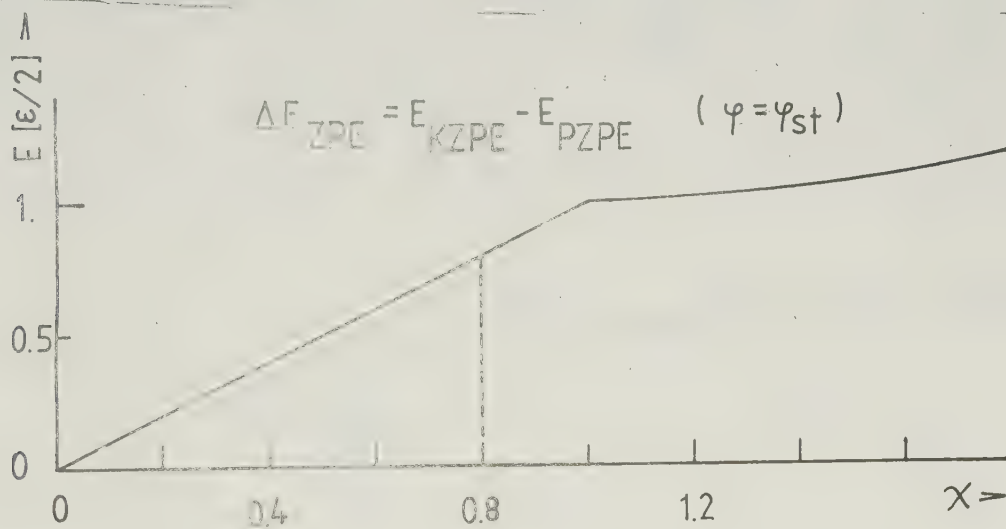


Abb.6

Differenz zwischen der kinetischen und der potentiellen Nullpunktsenergie als Funktion von χ beim Lipkin-Modell in dem statischen Punkt.

HF-Cranking-Näherung überein :

$$(M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q))^{-1} = 2 m_1^{\text{RPA}}(q) = 2 m_1^{\text{HF}}(q), \quad (5.40)$$

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q) = 2 m_{-1}^{\text{RPA}}(p) = 2 m_{-1}^{\text{HF}}(p). \quad (5.41)$$

Man kann zeigen, daß in diesem Modell die GCM-Masse mit Hilfe von HF-Momenten ausdrückbar ist. Aus (3.23) erhält man

$$\begin{aligned} M_{\text{GCM}}^{-1}(q) &= \frac{1}{2 \langle p^2 \rangle^2} \sum_{hh} [P_{hh}^* (\epsilon_h - \epsilon_h) P_{hh} + \\ &\quad + \mu \sum_{h'h'} (P_{hh}^* Q_{hh} Q_{h'h'}^* P_{h'h'} + P_{hh} Q_{hh}^* Q_{h'h'} P_{h'h'})] \\ &= \frac{1}{2 \langle p^2 \rangle^2} \sum_{hh} [|P_{hh}|^2 (\epsilon_h - \epsilon_h)] + \\ &\quad + \mu \sum_{h'h'} P_{h'h} Q_{h'h'}^* \left(\sum_{hh} P_{hh}^* Q_{hh} + \text{c.c.} \right) \\ &= \frac{\sum_{hh} |P_{hh}|^2 (\epsilon_h - \epsilon_h)}{2 \left(\sum_{hh} |P_{hh}|^2 \right)^2} = \frac{m_1^{\text{HF}}(p)}{2 (m_0^{\text{HF}}(p))^2} \quad (5.42) \end{aligned}$$

wobei die Tatsache benutzt wurde, daß $\sum_{hh} P_{hh} Q_{hh}^*$ eine reine imaginäre Zahl ist.

Aus der Ungleichung für HF-Momenten, die ähnlich der (3.13) ist, folgt daß

$$M_{\text{GCM}}(q) \leq M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q), \quad (5.43)$$

in Übereinstimmung mit (3.51).

Für den Fall einer Entartung (schematisches Schalenmodell, das gewöhnlich in Lehrbüchern diskutiert wird [Ro70]), sind die HF-Zustände kohärent, und man erhält :

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q) = M_{\text{ATDHF}}^{(0)}(q) = M_{\text{GCM}}(q) \quad (5.44)$$

Auch an Hand dieses Beispiels sieht man, daß die Tatsache, daß Slaterdeterminanten eine kohärente Situation beschreiben, eine Folge der Entartung des Spektrums sein kann.

VI- Modellberechnung der GCM-Masse und ZPE für Spaltung

VI.1 Vorstellung des Modells

In der GCM verfügt man über eine gewisse Freiheit bei der Auswahl der Testzustände, die einen geeigneten kollektiven Unterraum bilden. Schalenmodellzustände bieten sich wegen ihrer Einfachheit an. Für eine numerische Untersuchung der Aussagen, die in den Kapiteln III und IV gemacht wurden, berücksichtigen wir ein vereinfachtes TCSM, das durch Paarkräfte erweitert wird:

$$H = H_{\text{TCSM}} + V_p, \quad (6.1)$$

$$H_{\text{TCSM}}(z_0) = \sum_i \varepsilon_i(z_0) (a_i^\dagger a_i + a_{-i}^\dagger a_{-i}) \quad (6.1a)$$

$$V_p = -G \sum_{i,j} a_i^\dagger a_j^\dagger a_{-i} a_{-j} \quad (6.1b)$$

Hier ist z_0 die Hälfte des Abstandes zwischen den Zentren der zwei Oszillatormulden. Positive Indices bei den Summen bezeichnen zeitlich absteigende Anteilechenzustände.

Das TCSM wird oft für die Beschreibung des Spaltprozesses angewandt, da es das korrekte asymptotische Verhalten aufweist [HMG69, SGM74, HGS80]. Wir beschränken die Diskussion auf eine symmetrische Version, ohne Deformation der Fragmente und ohne gerundeten Scheitelpunkt (Abb. 7). Weiterhin werden die $\vec{l} \cdot \vec{s}$ und $\vec{l}^2$ Spin-Bahn Terme durch $l_z s_z$ bzw. l_z^2 ersetzt. Die Einteilchenenergien von (6.1a) erhält man aus der Darstellung von H_{TCSM} in Zylinderkoordinaten:

$$H_{\text{TCSM}}(z_0) = -\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 [\rho^2 + (|z| - z_0)^2] - \hbar \omega \left[l_z s_z + \mu \left(l_z^2 - \frac{1}{2} N(N+3) \right) \right]. \quad (6.2)$$

Ausgehend von $\hbar \omega(z_0=0) = 4.4 \text{ MeV}$ wird die Volumenerhaltung benutzt, um die Oszillatorfrequenz als Funktion von z_0 zu bestimmen:

$$\hbar \omega(z_0) = \hbar \omega(z_0=0) \left(1 - \frac{3}{2} \frac{z_0^2}{R^2} \right) \quad (6.3)$$

wobei $R(0)$ der Radius des vereinigten Systems ist

$$R(0) = 1.2 A^{1/3} \text{ fm} . \quad (6.3a)$$

Die Größe r ist die Lösung der kubischen Gl. :

$$2r^3 + 3r^2 z_0 - z_0^3 - 2R^3 = 0 , \quad z_0 \leq \frac{R(0)}{\sqrt[3]{2}} . \quad (6.3b)$$

Die Konstanten der Spin-Bahn-Kopplung wurden aus [SGM71] entnommen. Analytische Ausdrücke für die Wellenfunktionen dieses Modells können angegeben werden. Die Quantenzahlen $n_z(z_0)$ erhält man durch Anpassung der Wellenfunktionen bzw. deren Ableitungen in dem Punkt $z_0 = 0$.

Die Einteilchenenergien sind

$$\begin{aligned} \varepsilon_i &= \hbar \omega(z_0) \left[n_z(z_0) + |n_\varphi| + 2n_\rho + \frac{3}{2} \right] \\ n_\varphi &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots ; \quad n_\rho = 0, 1, 2, \dots . \end{aligned} \quad (6.4)$$

Durch die Bogoliugov-Valatin-Transformation entsteht aus (6.1) der Quasiteilchen-Hamiltonoperator

$$H = H_{\text{QPTCSM}} + V_{\text{res}} . \quad (6.5)$$

Der Anteil, der die Quasiteilchenzahl erhält, lautet

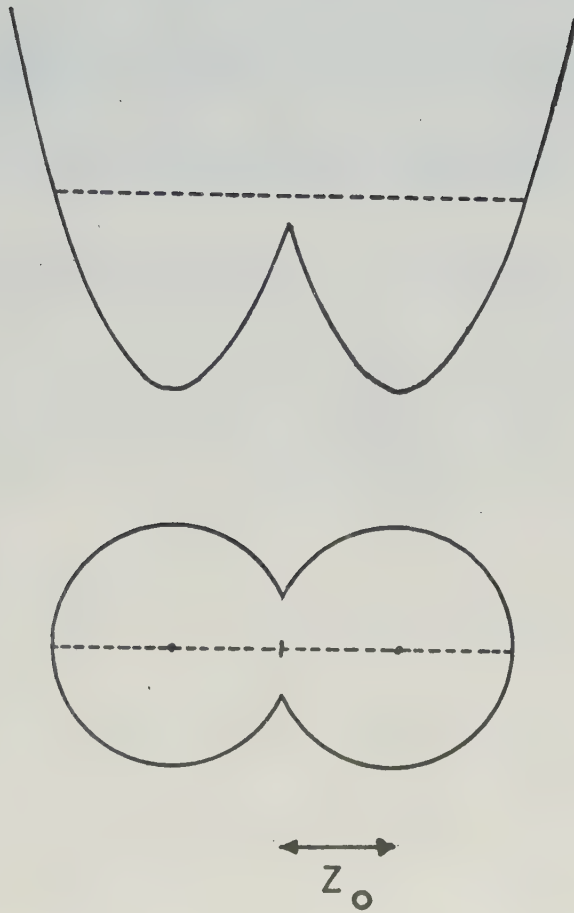
$$H_{\text{QPTCSM}}(z_0) = U(z_0) + \sum_{i>0} E_i(z_0) (\alpha_i^\dagger \alpha_i + \beta_i^\dagger \beta_i) \quad (6.5a)$$

$$U(z_0) = \sum_{i>0} (2v_i^2 \varepsilon_i - G v_i^4) - \frac{\Delta^2}{G} \quad (6.5b)$$

$$E_i(z_0) = [(\varepsilon_i(z_0) - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2} \quad (6.5c)$$

$$v_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\varepsilon_i - \lambda}{\varepsilon_i} \right)^{1/2} , \quad (6.5d)$$

während der Rest Terme mit 4, 3, bzw. 2 Quasiteilchenenerzeugungs-



TCSM

Abb. 7

Potentialmulden im Zweizentrenschalenmodell
und entsprechende Kernform.

operatoren enthält:

$$V_{res} = H_{40} + H_{22} + H_{31} \quad (6.5e)$$

$$H_{40} = G \sum_{i,j>0} u_j^2 v_i^2 d_j^\dagger \beta_j^\dagger d_i^\dagger \beta_i^\dagger + c.c. \quad (6.5f)$$

$$H_{31} = -G \sum_{i,j>0} (v_i^2 - u_i^2) u_j v_j (d_i^\dagger \beta_i^\dagger \beta_j^\dagger \beta_j + \\ + u_j v_j d_i^\dagger \beta_i^\dagger d_j^\dagger d_j) + c.c. \quad (6.5g)$$

$$H_{22} = G \sum_{i,j>0} [(u_i^2 u_j^2 + v_i^2 v_j^2) d_i^\dagger \beta_i^\dagger d_j \beta_j + \\ + u_i v_i u_j v_j (d_i^\dagger d_i d_j v_j + \beta_i^\dagger \beta_j^\dagger \beta_i \beta_j + \\ + 2 d_i^\dagger \beta_j^\dagger d_i \beta_j)] + c.c. \quad (6.5h)$$

Wir nehmen den Potentialparameter z_0 als Generatorkoordinate. Es ist nützlich, die BCS-Grundzustände des Hamiltonoperators (6.5a) als erzeugende Zustände zu wählen:

$$|q\rangle = |z_0\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{-i}^\dagger) | \rangle \quad (6.6)$$

mit

$$u_i = \sqrt{1 - v_i^2} \quad (6.6a)$$

Somit wurde ein Teil der residualen Wechselwirkung V_p in den korrelierten, erzeugenden Zuständen (6.6) berücksichtigt.

Der Effekt des Operators $P = i\hbar \frac{\partial}{\partial z_0}$ auf die Zustände $|z_0\rangle$ kann folgendermaßen dargestellt werden [BDJ72, LP73]:

$$P |z_0\rangle = \sum_{j,k>0} i\hbar P_{jk}(z_0) d_j^\dagger \beta_k^\dagger |z_0\rangle \quad (6.7)$$

mit

$$P_{jk}(z_0) = - \langle k | \frac{\partial H_{TCSM}}{\partial z_0} | j \rangle \frac{\mu_j v_k + \mu_k v_j}{E_j + E_k}, \quad j \neq k$$

$$P_{jj}(z_0) = - \frac{\Delta}{2E_j^2} \langle j | \frac{\partial H_{TCSM}}{\partial z_0} | j \rangle - \frac{\partial \lambda}{\partial z_0} - \frac{\epsilon_i - \lambda}{\Delta} \frac{\partial \Delta}{\partial z_0}$$

$$\frac{\partial H_{TCSM}}{\partial z_0} = m\omega^2(z_0 - |z|) + m\omega\omega' [p^2 + (|z| - z_0)^2] + \kappa \hbar \omega' [2l_z \lambda_z + \mu (l_z^2 - \frac{1}{2} N(N+3))]$$

In einem reinen Schalenmodellbild gelten die Identitäten:

$$P_{jk}(z_0) = - \frac{\langle k | \frac{\partial H_{TCSM}}{\partial z_0} | j \rangle}{E_k - E_j}, \quad j \neq k, \quad (6.8a)$$

$$P_{jj}(z_0) = 0. \quad (6.8b)$$

Die BCS-Näherung verringert die nichtdiagonalen Terme P_{jk} , $j \neq k$, und ergibt nichtverschwindende diagonale Terme P_{jk} . Die erste Tatsache ist der Grund für die quantitativ korrekte Beschreibung des experimentellen Trägheitsmoments für seltene Erden [Ro70].

Die Auswirkungen der residualen Wechselwirkung, die nach der Transformation in das Quasiteilchenbild übrigbleibt, sind zweifach. Auf der einen Seite modifiziert sie den Anregungsterm $\langle P \bar{H} P \rangle$ (es ist zu erwarten, daß dieser niedriger wird) und auf der anderen Seite trägt sie zu dem Korrelationsterm $\langle \bar{H} P^2 \rangle$ bei. Die Korrektur zum Anregungsterm rührt von H_{22} her, der Korrelationsterm wird von H_{40} bestimmt. Die Berechnung von beiden Termen ergibt

$$\begin{aligned}
\langle P \bar{H} P \rangle &= \sum_{j,k>0} \hbar^2 p_{jk}^2 (E_j + E_k) - \\
&\quad - G \sum_{j,k>0} \hbar^2 p_{jj} p_{kk} [(u_j u_k)^2 + (v_j v_k)^2] - \\
&\quad - 2G \sum_{j,k>0} \hbar^2 p_{jk}^2 u_j v_j u_k v_k, \quad (6.9)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \bar{H} P^2 \rangle &= -4G \sum_{j,k>0} \hbar^2 (p_{jj} p_{kk} - p_{kj} p_{jk}) \cdot \\
&\quad \cdot [(u_j v_k)^2 + (u_k v_j)^2]. \quad (6.10)
\end{aligned}$$

Der Faktor $\langle P^2 \rangle$ hat einen rein kinematischen Ursprung:

$$\langle P^2 \rangle = \sum_{j,k>0} \hbar^2 p_{jk}^2. \quad (6.11)$$

Für die Ausführung der Modellberechnung wurde ein System mit $Z=92, A=236$ ausgewählt. Dieses System, das wegen der Vereinfachungen keinem realen Kern entspricht, sollte schwer genug sein, um die Gültigkeit der GOA zu gewährleisten. In [Re76] wurde gezeigt, daß der Überlappkern mit TCSM-Zuständen in der BCS-Näherung durch die GOA sehr zufriedenstellend genähert werden kann, falls die Teilchenzahl über $A \gtrsim 40$ liegt.

Die BCS-Parameter wurden mit Hilfe des Formalismus von [BDJ72] bestimmt. Die Paarungsstärke läßt sich schreiben als

$$G = [\bar{g}(\bar{\lambda}) \log \left(\frac{2\Omega}{\bar{\Delta}} \right)]^{-1}, \quad (6.12)$$

und die Niveauezahl auf beiden Seiten der Fermikante ist

$$n = 2 \bar{g}(\bar{\lambda}) \Omega, \quad (6.13)$$

wobei $\Omega = 8 \text{ MeV}$, $\bar{\Delta} = 12 A^{-1/2} \text{ MeV}$ sind, und $\bar{g}(\bar{\lambda})$ die auf der Fermienergie berechnete, geglättete Paardichte ist.

Die Werte von $\bar{g}(\bar{\lambda})$ für Neutronen bzw. Protonen wurden nach der Strutinsky-Vorschrift berechnet. Für den Punkt $z_0 = 2 \text{ fm}$

(der der minimalen Niveaudichte entspricht) erhält man somit :

$$G_n = \frac{20.61}{A} \quad , \quad n_n = 60 \quad , \quad (6.14)$$

$$G_h = \frac{28.63}{A} \quad , \quad n_h = 44 \quad . \quad (6.15)$$

Die BCS-Gleichungen lauten :

$$\sum_{i>0}^1 v_i^2 = 2n \quad , \quad (6.16)$$

$$\frac{1}{G} = \frac{1}{2} \sum_{i>0}^1 \frac{1}{E_i} \quad , \quad (6.17)$$

wobei die Summen auf n Zustände um die Fermikante beschränkt werden. Die resultierende Energielücke für Neutronen bzw. für Protonen als Funktion von z_0 werden in Abb. 8 gezeigt. Die Energielücke für Neutronen geht für große Werte von z_0 gegen Null, da bei dem betrachtete Modell ein Schalenabschluß auftritt (siehe das Einteilchenspektrum in der Nähe der Fermikante für Neutronen in Abb. 9).

VI.2 Berechnung der Masse

In Abb. 10 werden die Anregungs- und Korrelationsbeiträge zu dem inversen Massenparameter gemäß (6.9), (6.10) und (6.11) dargestellt (die Zahl der zu diesen Größen beitragenden Zustände wurde ähnlich wie bei der Diskussion der BCS-Gleichungen beschränkt). Der erste Beitrag ist deutlich dominant. Der Anregungsterm wird bezüglich des reinen Schalenmodells durch die residuale Paarungswechselwirkung (6.5e) geringfügig gesenkt. Für große Abstände werden die Anregungs- und Korrelationsbeiträge nahezu konstant.

In Abb. 11 werden die GCM- und Cranking-Massen verglichen. Die Kurven zeigen eine ähnliche Schalenstruktur, jedoch ist die GCM-Kurve glatter. Die Tatsache, daß die GCM-Masse eine glattere Deformationsabhängigkeit als die Cranking-Masse zeigt, kann leicht verstanden werden. Die dominanten Beiträge zu der

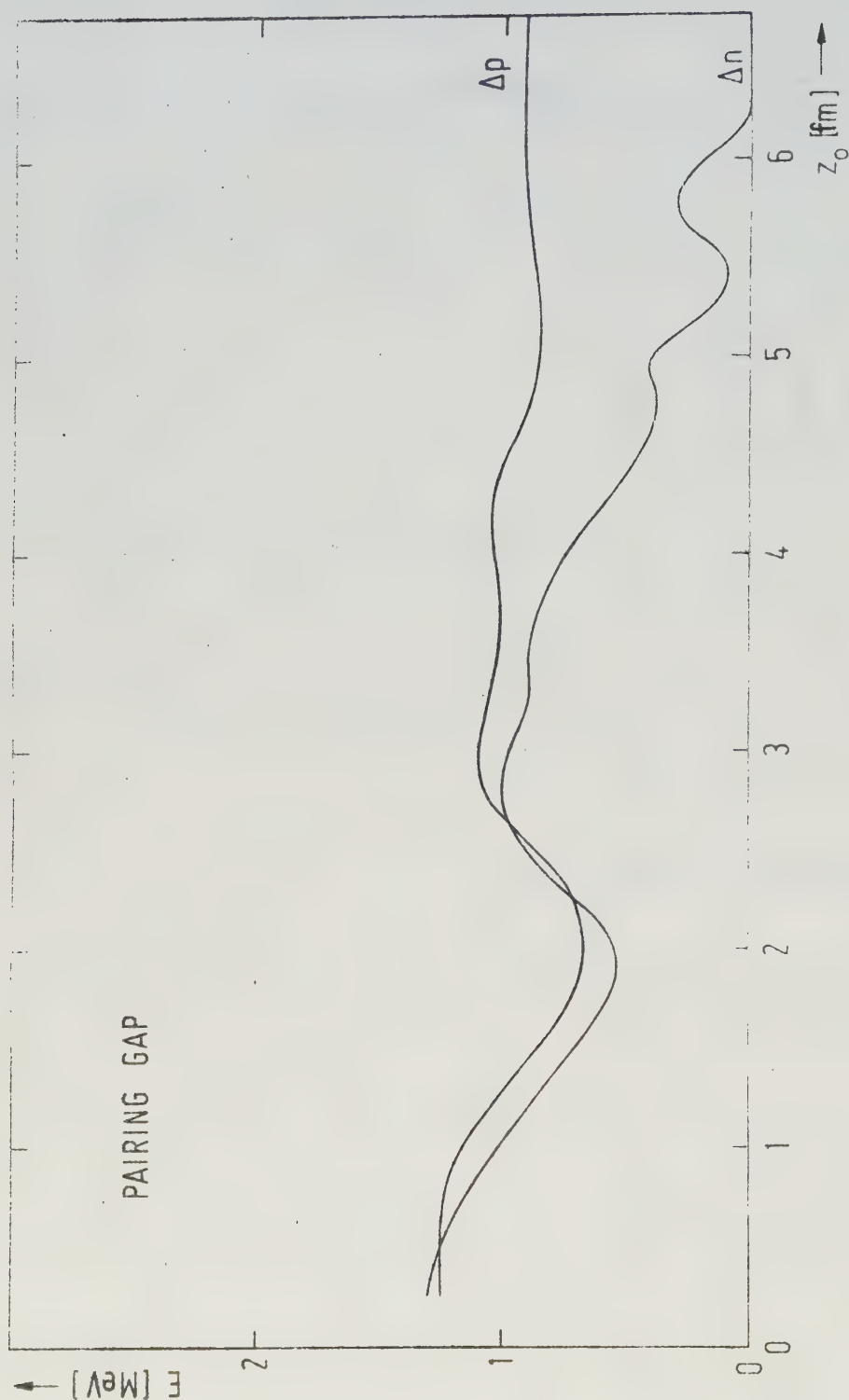


Abb.8

Paarungslücke für Neutronen und Protonen für das vereinfachte TCSM als Funktion der kollektiven Koordinate z_0

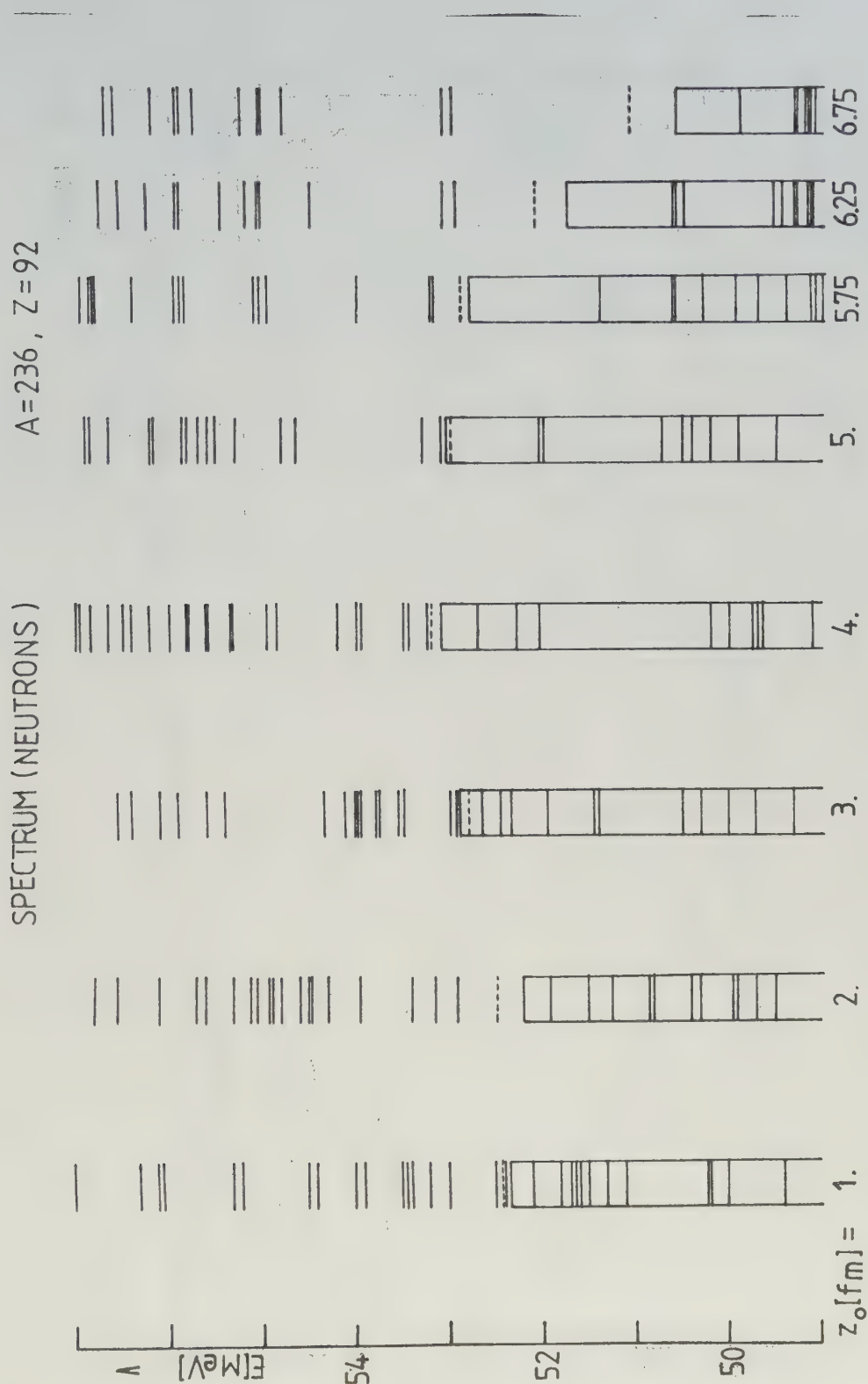


Abb9

Neutronenspektrum um die Fermikante für das System $A=236, Z=92$. Die besetzten Zustände in dem Schalenmodell sind eingerahmt. Die BCS-Fermienergien sind markiert (- - - - -)

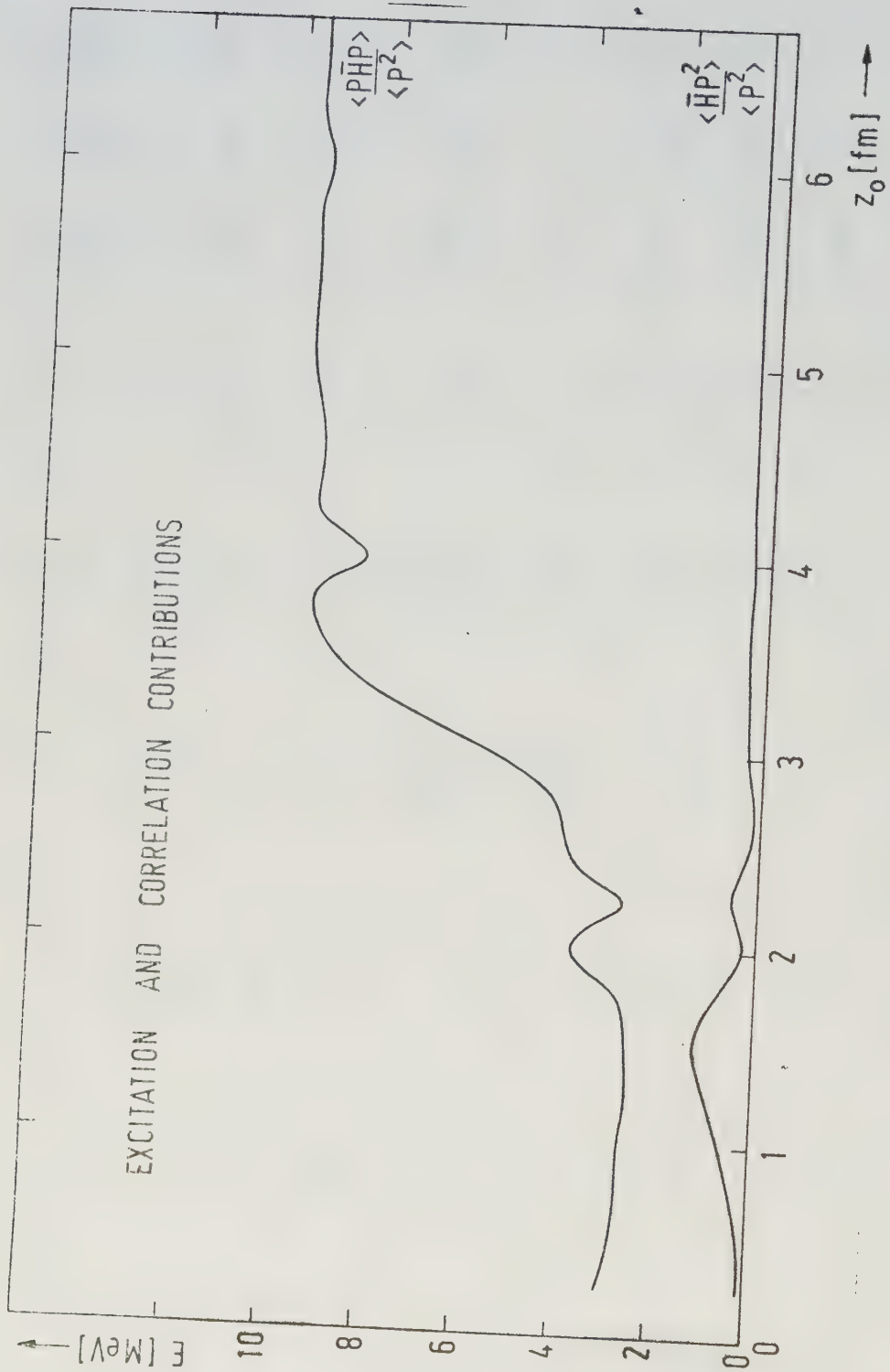


Abb.10

Anregungs- und Korrelationsbeiträge zu der GCM-Masse
im Rahmen des TCSM.

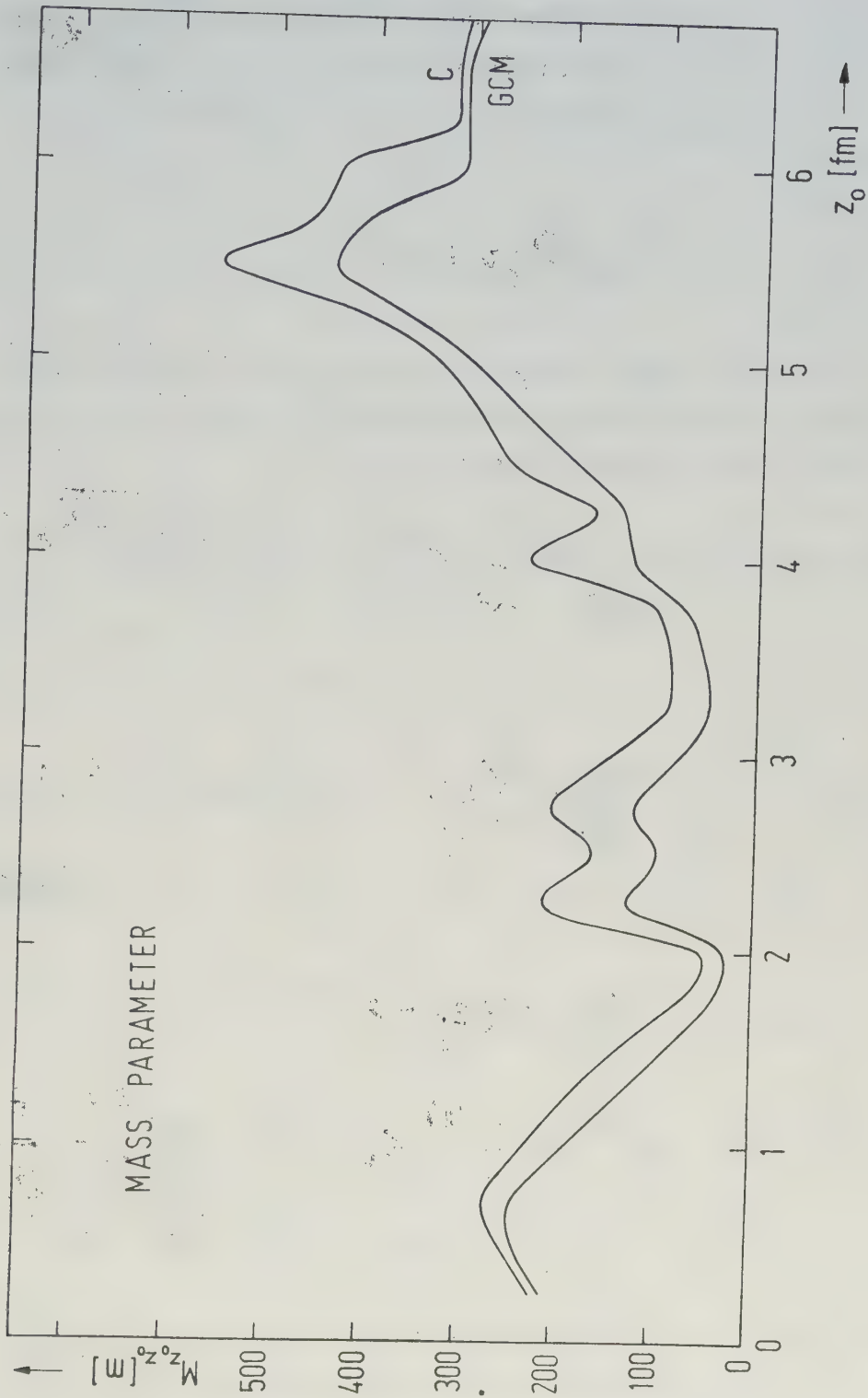


Abb. 11

Cranking- und GCM-Masse im TCSM

GCM-Masse entstammen einem breiteren Band von Niveaus um die Fermienergie. Dies wird aus der folgende Diskussion deutlich, wobei der Einfachheit halber residuale Kräfte weggelassen werden.

Auf der ersten Stufe der Spaltung (bis zu $z_0 \approx 4.5 fm$) dominieren die diagonalen Terme P_{jj} über die nichtdiagonalen Terme P_{jk} , $j \neq k$;

$$|P_{jj}| \gg |P_{jk}|, \quad j \neq k. \quad (6.18)$$

Unter Berücksichtigung nur von den diagonalen Termen kann man die inverse GCM-Masse folgendermaßen schreiben (siehe Anhang 3 für die Herleitung dieser Formel):

$$M_E(z_0) \approx \frac{1}{4\Delta^3} \frac{\hbar^2 (n^{(4)})^2}{n^{(3)}} \overline{(k_j - \bar{k}_j)^2}, \quad (6.19)$$

wobei

$$n^{(l)} = \sum_j \left(\frac{\Delta}{E_j} \right)^l, \quad l = 4, 3, \quad (6.20)$$

effektive Niveauzahlen sind, die zu $\langle p^2 \rangle$ bzw. zu $\langle p \bar{H} p \rangle$ beitragen und

$$k_j = E_j - (E_j - \lambda) \frac{\Delta}{\Delta}, \quad (6.21)$$

$$\bar{k}_j = \sum_j f_j^{(3)} k_j, \quad f_j^{(l)} = \frac{E_j^{-l}}{\sum_k E_k^{-l}}$$

sind.

(6.22)

Das Ergebnis (6.19) wollen wir mit der unter Verwendungen der selben Näherungen hergeleiteten Cranking-Formel [St77]:

$$M_C(z_0) = \frac{\hbar^2}{4\Delta^3} n^{(5)} \overline{(k_j - \bar{k}_j)^2} \quad (6.23)$$

vergleichen. Die Ungleichung zwischen den Ausdrücken (6.19) und (6.23), die aus

$$n^{(3)} n^{(5)} > (n^{(4)})^2 \quad (6.24)$$

folgt, stimmt mit (3.8) überein. Da $n^{(l)} > n^{(m)}$, wenn $l < m$, erkennt man, daß (6.19) größere effektive Niveaunumahlen als (6.23) besitzt, wie wir zeigen wollten.

Die absoluten Minimalwerte der zwei Massen erhält man für den Punkt $z_0 = 2 \text{ fm}$, der annähernd dem Minimum der potentiellen Energie entspricht. Für $z_0 = 2 \text{ fm}$ existiert eine geringere Niveaudichte an der Fermikante. Diese Aussage wurde durch die Berechnung der Schalenkorrektur nach Strutinsky überprüft (siehe Abb. 17). Wie man aus der Abb. ablesen kann, findet man für $z_0 = 2 \text{ fm}$ ein lokales Maximum bzw. Minimum der Anregungs- bzw. Korrelationsterme.

Gerade vor dem Zerreißpunkt $z_0 = 5.9$ findet man eine markante Spitze in der Masse. Eine gerade vor dem Spalt-punkt Spitze in der Masse wurde auch im Rahmen des TCSM von Urbano, Goeke und Reinhard für das System $O^{16} + O^{16}$ gefunden [UGR81]. Im Rahmen der ATDHF-Methode in der Reaktion $C^{12} + C^{12}$ ist sie besonders ausgeprägt (die benutzte Wechselwirkung führte zu der Cranking-Masse) [FHV80].

Wie in Abb. 12 zu sehen ist, tragen in diesem Gebiet ($z_0 \gtrsim 4.5 \text{ fm}$) die nichtdiagonalen Termen am meisten zu der Masse bei. Die GCM-Masse stimmt dabei praktisch mit ihrer nichtdiagonalen Approximation überein, indem die Cranking-Masse höher als ihr nichtdiagonaler Anteil ist. In Zusammenhang mit der Diskussion von nichtadiabatischen Effekten, wurde kürzlich von Schütte [Sc81] vorgeschlagen, daß für die letzte Phase der Spaltung der nichtdiagonale Anteil der Cranking-Masse allein ausreicht, um die kollektive Trägheit eines Spaltkernes darzustellen (Paarenanregungen tragen nicht bei, wenn Niveauekreuzungen korrekt behandelt werden). Es ist bemerkenswert, daß bei der GCM kaum ein Unterschied zwischen der gesamten Masse und ihrer nichtdiagonalen Näherung für die letzte Phase der Spaltung existiert.

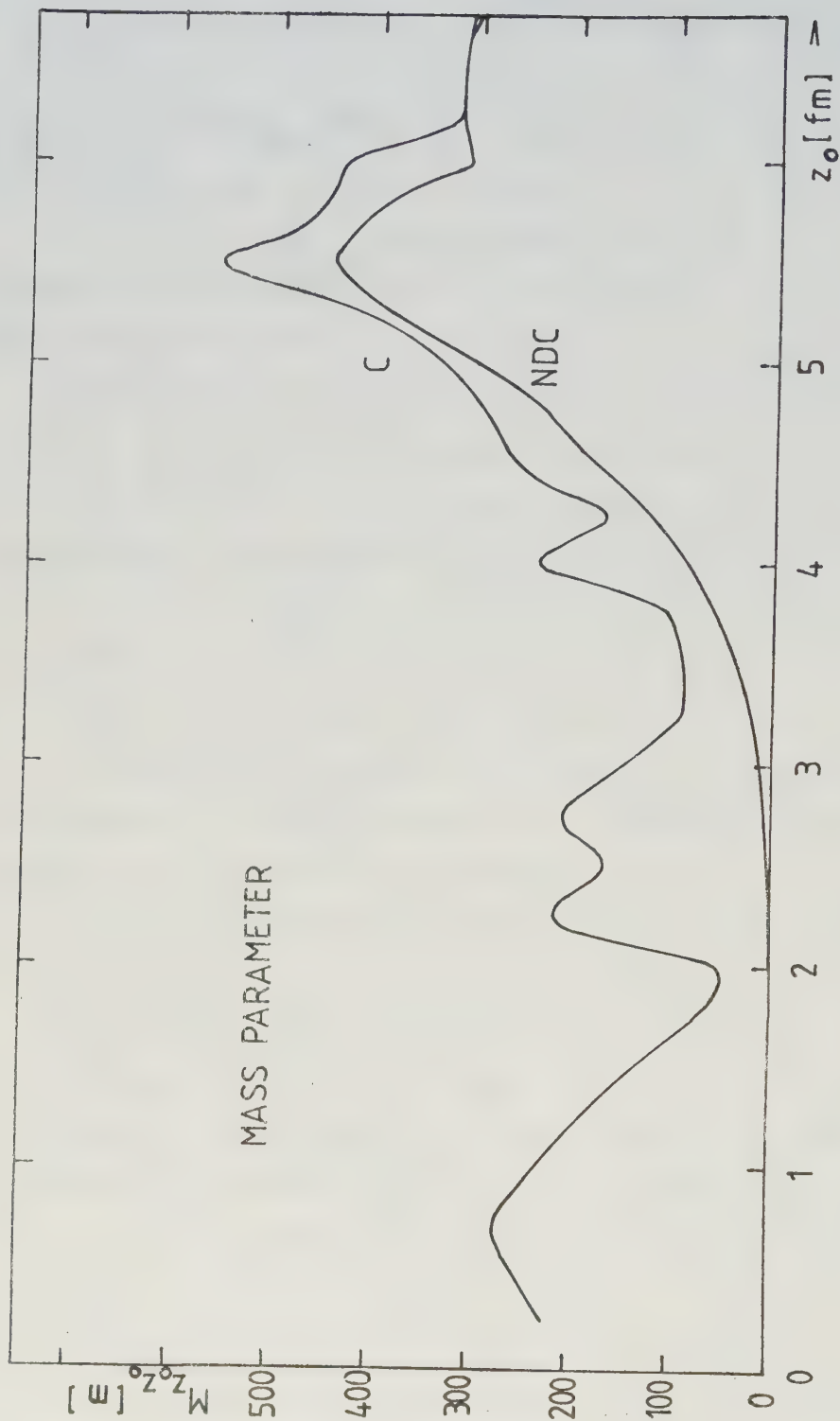


Abb.12

Genäherte Cranking-Masse, wobei nur außerdiagonale
 Matrixelemente berücksichtigt werden (TDC), im
 Vergleich mit der kompletten Cranking-Masse (C).

In dem asymptotischen Gebiet wurden die Massen einen konstanten Wert, der etwas höher (20%) als die reduzierte Masse $M_{z_0 z_0} = 236 \text{ m}$ ist. Die Ursache liegt wohl darin, daß das hier^o verwandte Modell nicht realistisch genug ist. Schwierigkeiten bei der Erlangung der reduzierten Masse wurden auch für kompliziertere Cranking-Berechnungen erwähnt [BC80].

Es sei noch erwähnt, daß mit Ausnahme des asymptotischen Bereiches die Koordinate z_0 des TCSM nicht mit der Hälfte des wirklichen Abstandes zwischen den Schwerpunkten der auslaufenden Fragmente

$$R = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \langle i | z | i \rangle_{z \geq z_0} v_i^2, \quad (6.25)$$

identifiziert werden kann [LDM72]. Die Beziehung zwischen R und z_0 wird in Abb. 13 gezeigt und die Cranking-Masse

$$M_{RR} = M_{z_0 z_0} \left(\frac{dz_0}{dR} \right)^2 \quad (6.26)$$

als Funktion der Koordinate R in Abb. 14 dargestellt.

Für das vorliegende Modell (wie für das Lipkin-Modell oder für das Quadrupol-Quadrupol-Modell ohne Entartung des Spektrums) ist die GCM-Masse immer niedriger als die Cranking-Masse. Die Differenz beträgt durchschnittlich 25%, kann aber 48% erreichen (diese maximale relative Abweichung bezieht sich auf den Punkt $z_0 = 2 \text{ fm}$). Die ohne den Effekt der residualen Kräfte berechnete GCM-Masse ist bereits niedriger als das Cranking-Ergebnis, in Übereinstimmung mit der Ungleichung (3.8). In dem Einteilchenbild ist die Differenz durchschnittlich 20% und ihre Einzelwerte stimmen mit der Ungleichung (3.31) überein. Die aus der residualen Wechselwirkung folgende Korrektur der Anregungsenergie und des Korrelationskoeffizienten haben entgegengesetzte Vorzeichen. Letzterer ist positiv und, da er größer ist, resultiert eine Abnahme der Masse.

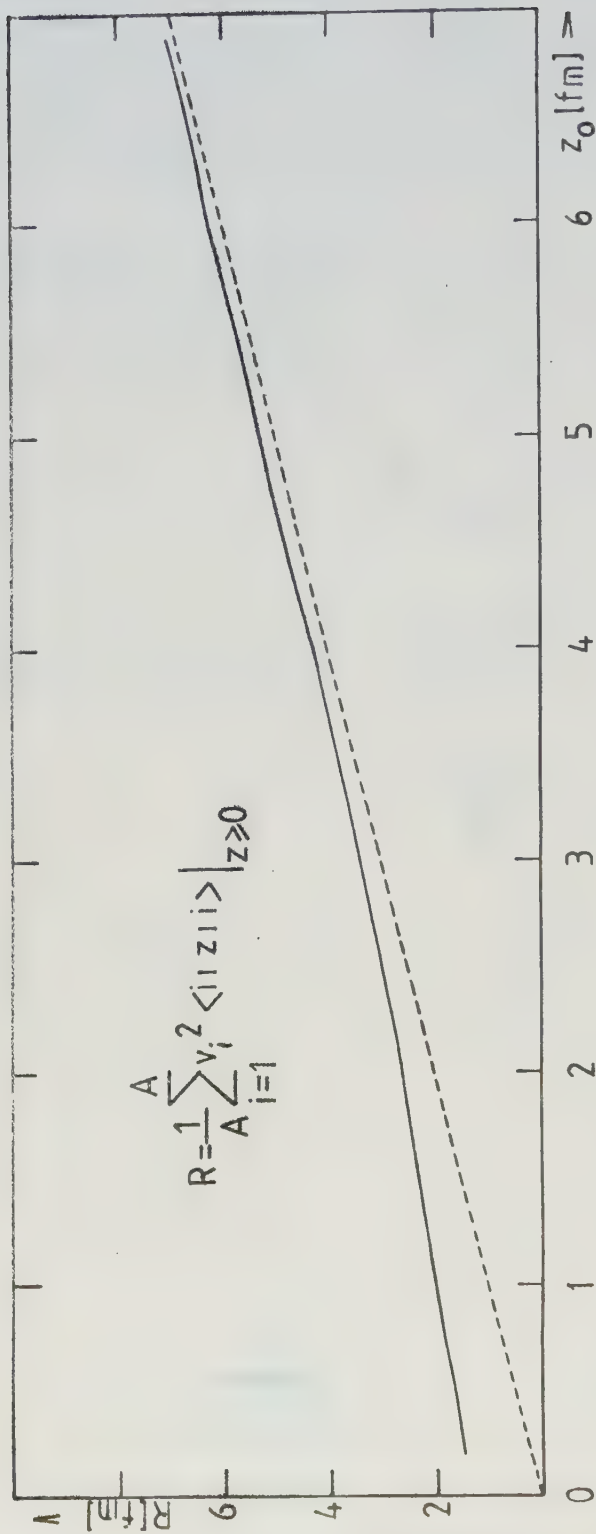


Abb. 13

Beziehungen zwischen R und z_0

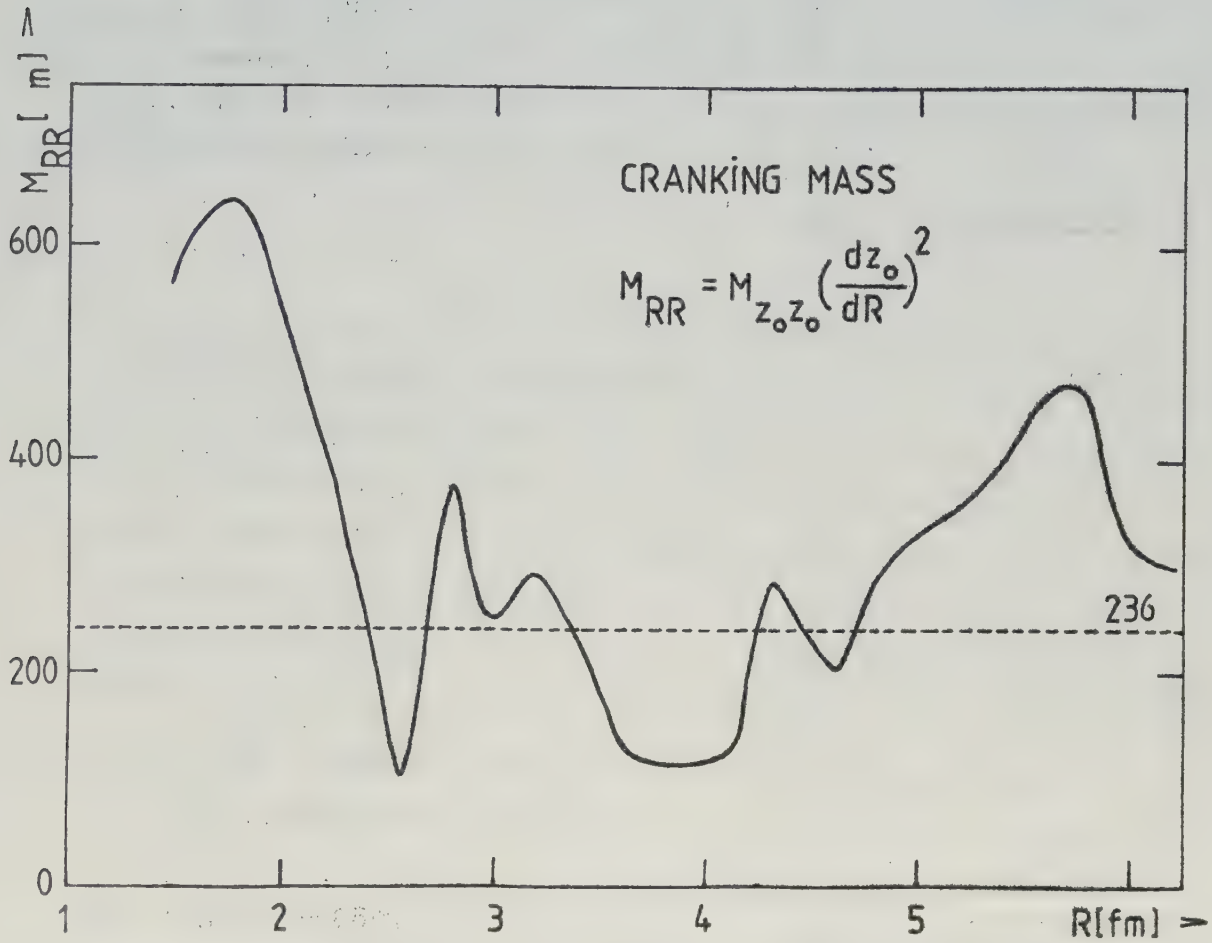


Abb. 14

Die Cranking Masse M_{RR} als Funktion von R

Der Effekt der notwendigen Teilchenzahlprojektion auf die Masse mußte für eine realistische Beschreibung noch berücksichtigt werden [FH79]. Man kann sogar zeigen, daß aus der Teilchenzahlerhaltung das Verschwinden aller aus der Monopolpaarung resultierenden residualen Beiträge folgt [JM75, DS82]. In der vorliegenden Arbeit wollten wir nur die Fähigkeit der GCM-Masse andeuten, daß sie ohne großen Aufwand residuale Kräfte einschließen kann. Eine Erweiterung bildet der Übergang auf Quadrupolpaarung [JM75]. Während für die Monopolpaarung alle Paare gleichermaßen behandelt werden, werden bei der Quadrupolpaarung die Paare nach ihrem Quadrupolmoment unterschieden.

VI.3 Berechnung der ZPE

In Abb.15 werden die kinetischen ZPE der GCM dargestellt, die mit und ohne der Berücksichtigung der residualen Kräfte berechnet wurden. Zum Vergleich wird dabei die kinetische ZPE hinzugefügt, wobei die Cranking-Näherung für die Masse eingesetzt wurde. Die Differenz zwischen der kinetischen ZPE mit den GCM- bzw. Cranking-Massen ist dieselbe wie die zwischen den entsprechenden Massen. Wie bereits bei einer ähnlichen Berechnung für das leichtere System $Z=52, A=112$ gefunden worden war [Re76], ist die kinetische ZPE der GCM ohne residuale Kräfte durchschnittlich 20% größer als das Cranking-Ergebnis. Die hier berücksichtigten residualen Kräfte vergrößern die Diskrepanz.

Sowohl für fast kugelförmige Konfigurationen als auch für den asymptotischen Bereich von zwei separierten Kernen stimmen die kinetischen ZPE mit der GCM- und der Cranking-Masse sehr gut überein. Der Wert der kinetischen ZPE der GCM für die erste Phase der Spaltung kann mit Hilfe von (6.19) und (8.19) erklärt werden. Er soll ungefähr gleich der Energielücke sein:

$$E_{\text{KZPE}}^{\text{GCM}} = \Delta \frac{n^{(3)}}{n^{(4)}}$$

$$\text{woraus, mit } n^{(3)} \simeq n^{(4)}, \quad (6.27)$$

$$\simeq \Delta, \quad (6.27)$$

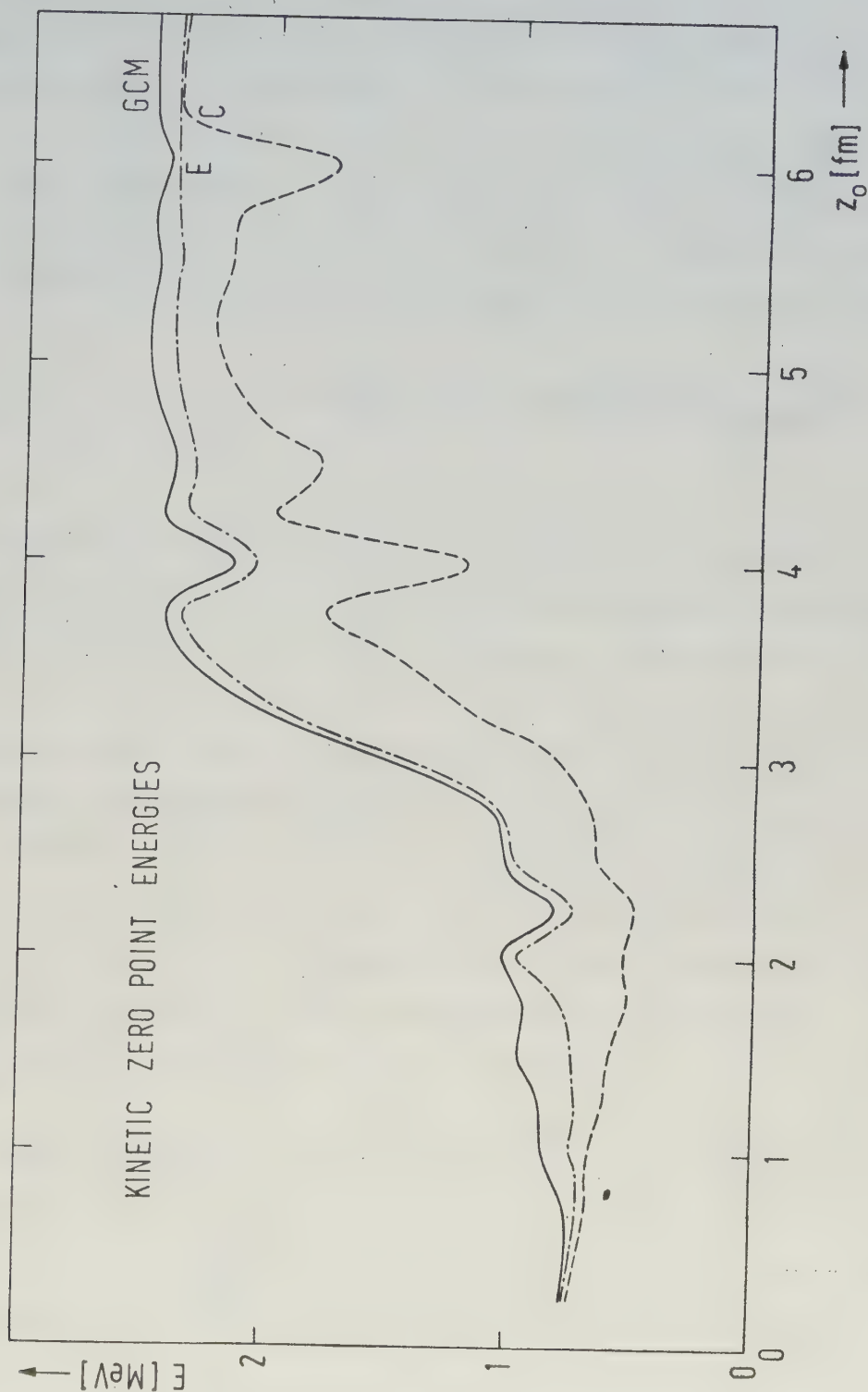


Abb. 15

Die kinetische Nullpunktsenergie der GCM mit (GCM, —) und ohne (E, - - - -) residuale Kräfte, im Vergleich mit der kinetischen Nullpunktsenergie mit der Cranking-Masse (C, - · - · -)

Für die zweite Phase der Spaltung nimmt die kinetische ZPE zu, was auf eine Zunahme des Einflusses der nichtdiagonalen Beiträge zurückzuführen ist (siehe hierzu Abb.16). In dem asymptotischen Bereich ist sie ungefähr $1/4$ der Schalenmodell-anregung.

Die potentielle ZPE wurde für den statischen Punkt $z_0 = 2 \text{ fm}$ durch eine einfache numerische Differentiation der BCS-Grundzustandsenergie(6.5b) plus der klassisch berechneten Coulombenergie bestimmt. Man erhält somit den Wert

$$E_{pzpe}(z_0 = 2 \text{ fm}) = 8.0 \text{ MeV}, \quad (6.28)$$

der bei weitem größer als die kinetische ZPE für dieselbe Mode ist. Die Diskrepanz ist gewiß in Bezug auf das realistischere, in Kapitel IV betrachtete Schema übertrieben, da der Hamiltonoperator unseres Modells explizit von der kollektiven Koordinate abhängt.

Außerdem berechneten wir die potentielle ZPE, die man durch Differentiation der aus einem Tröpfchenmodell plus Schalenkorrekturen bestehenden potentiellen Energie erhält. Diese Potentialenergiekurve ist in Abb.17 dargestellt (die Tröpfchenmodellparameter wurden aus [Ni72] entnommen, die Paarungskorrektur wurde nicht berücksichtigt). Zum Vergleich zeigt Abb.18 die Potentialenergiekurve, die man durch Aufsummieren der Energien der besetzten Einteilchenzustände in H_{TCSM} erhält.

Die potentielle ZPE ist für die stationären Punkte bedeutend (hierzu Abb.19). Insbesondere für $z_0 \approx 2 \text{ fm}$ ergibt sich :

$$E_{pzpe}(z_0 = 2 \text{ fm}) = 4.4 \text{ MeV} \quad (6.29)$$

VI. 4 Berechnung der Spaltdynamik

Es ist gut erkennbar, daß bei der WKB-Durchlässigkeit (2.57) die Masse und das Potential gleichen Einfluß besitzen. Eine

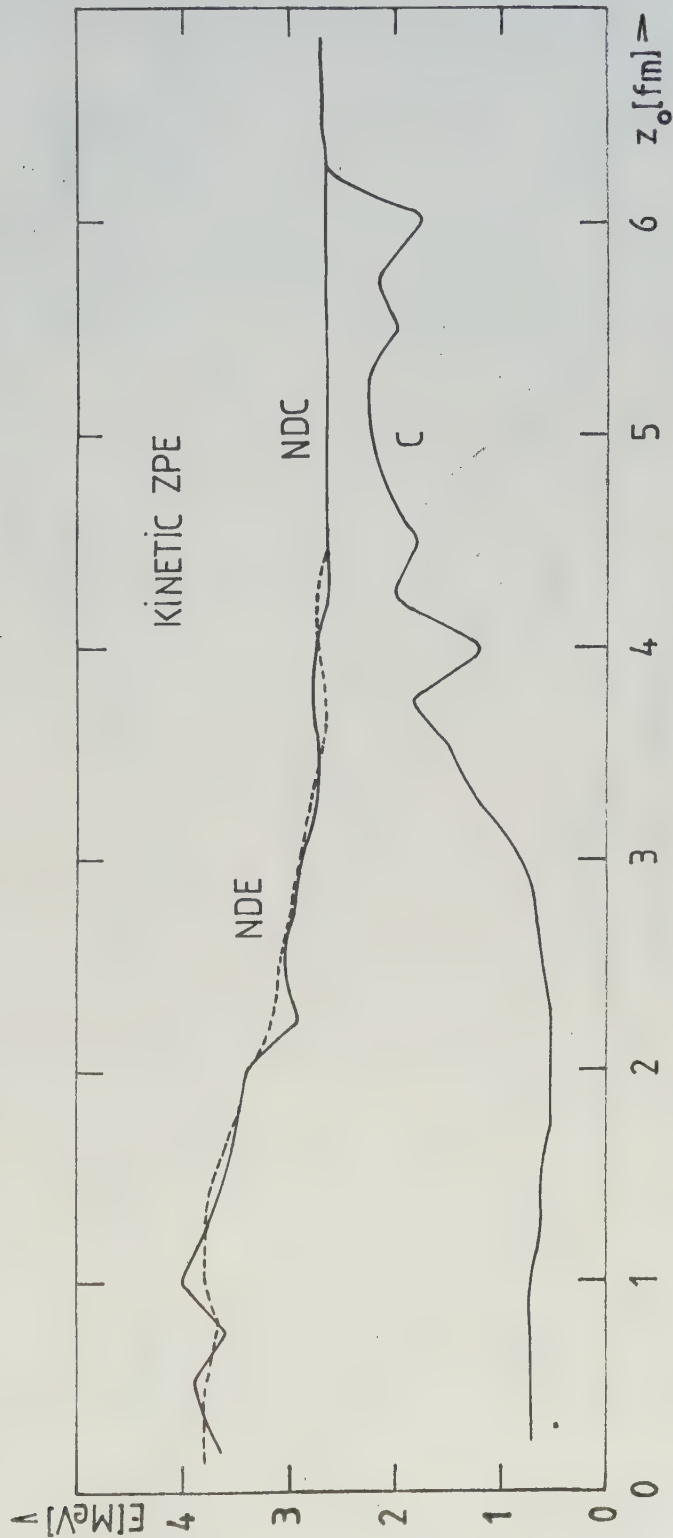


Abb.16

Kinetische Nullpunktenergie mit der Cranking-Masse (C, ———), mit der "außerdiagonalen" Cranking-Masse (NDC, ———) und mit der "außerdiagonalen" GCM-Masse ohne residualen Wechselwirkung (NDE, - - - - -)

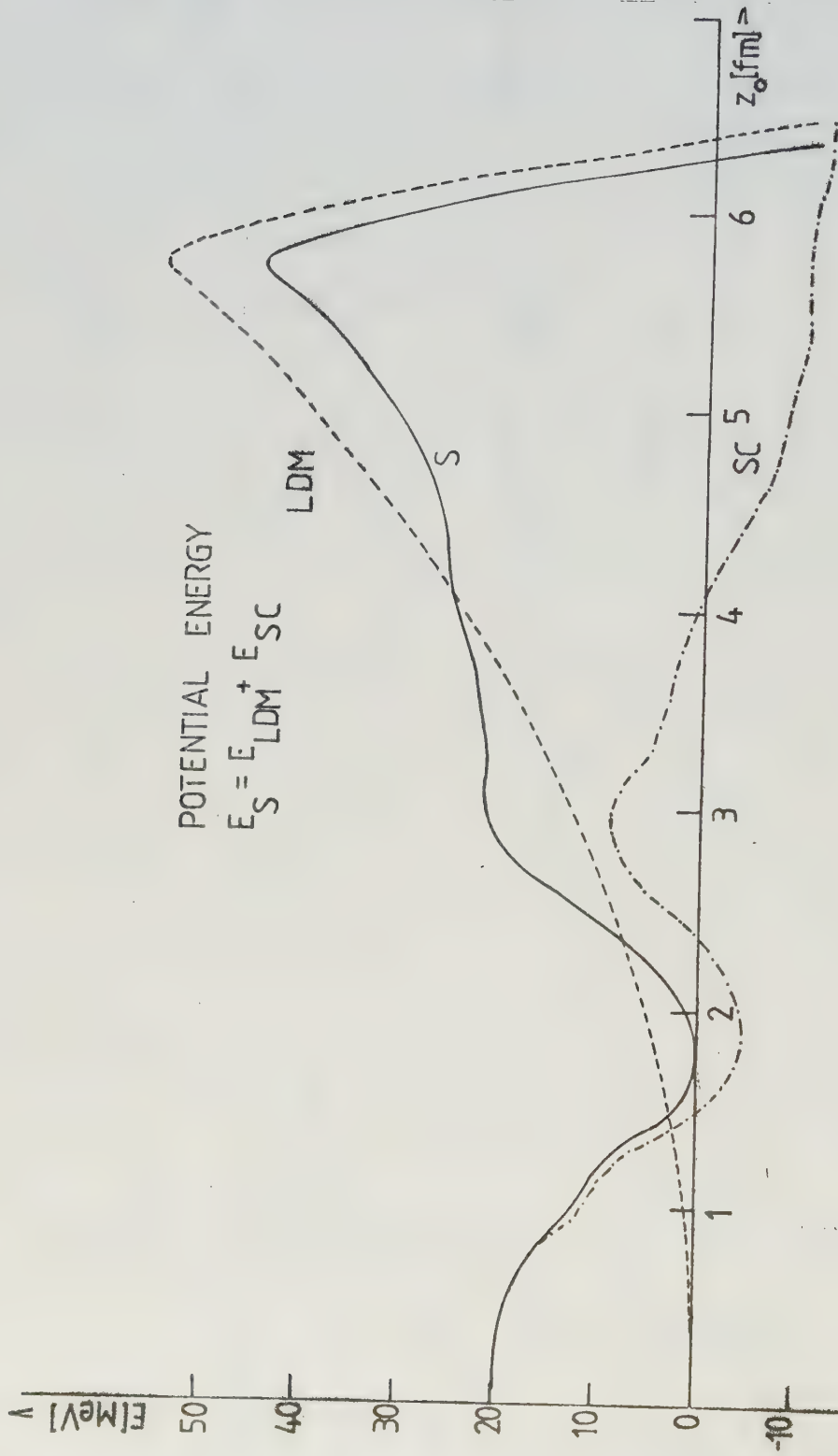


Abb. 17

Potentialenergiekurve berechnet nach der Strutinsky-Methode (S , —))
 Der Tröpfchenmodellanteil (LDM , - - - - -) und der Schalenkorrekturanteil
 (SC , - · - · -) werden gezeigt.

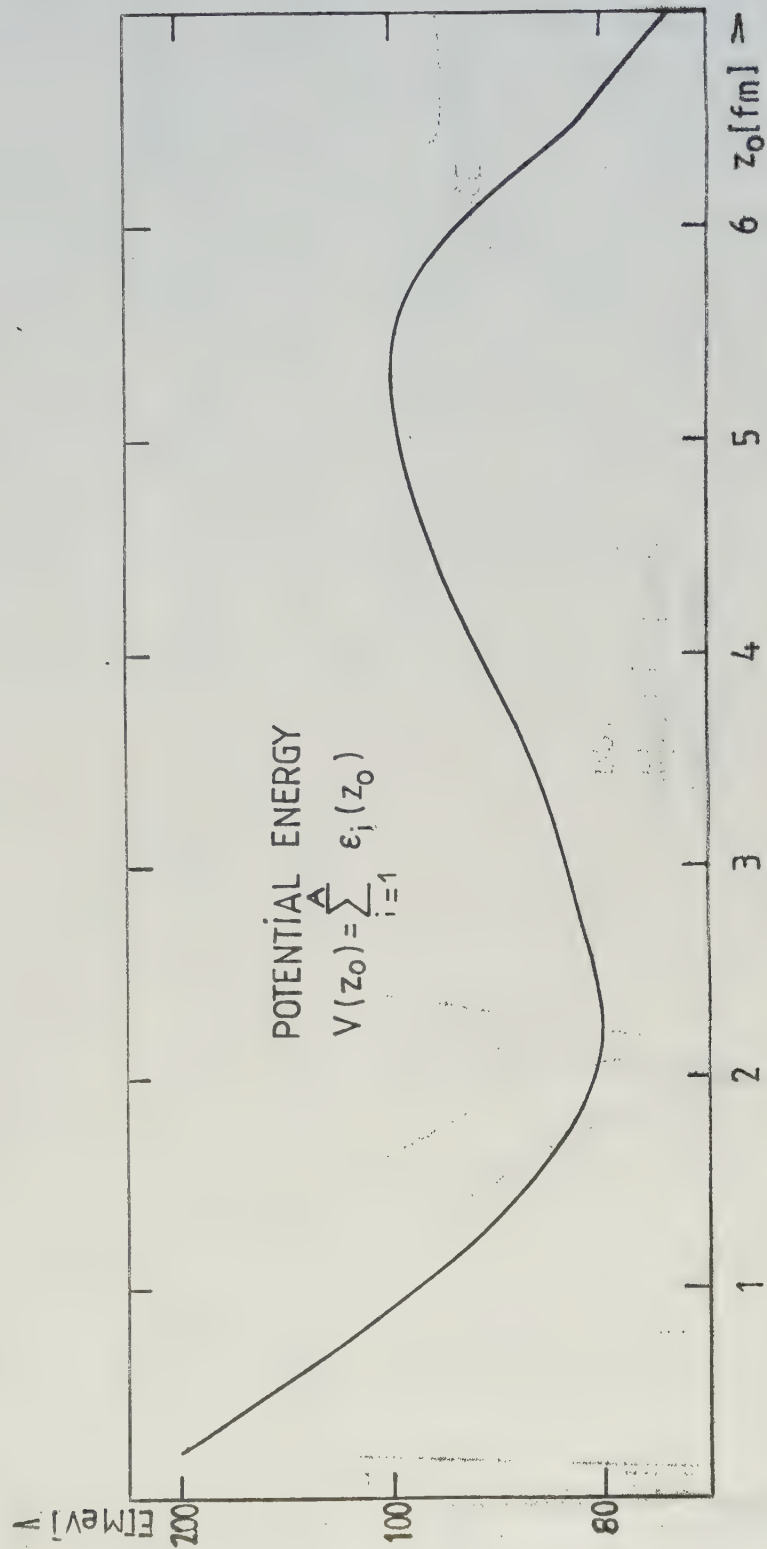


Abb. 18

Potentialenergiekurve berechnet durch Aufsummieren der besetzten Einteilchenzustände.

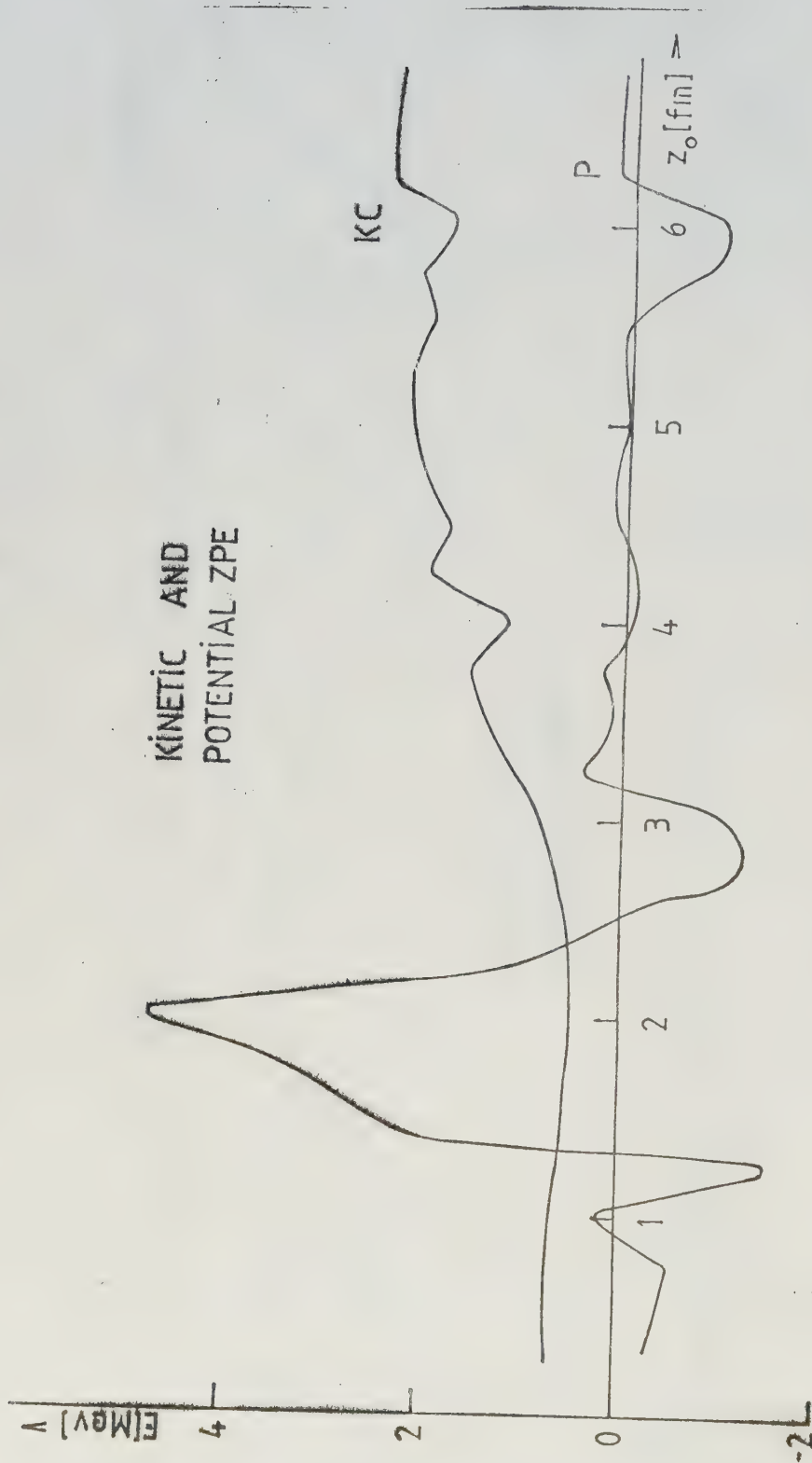


Abb. 19

Kinetische Nullpunktsenergien mit der Cranking-Masse
im Vergleich mit der potentiellen Nullpunktsenergie
(bezogen auf die Potentialenergiekurve aus Abb. 17)

geringfügige Modifizierung der Masse führt zu einer erheblichen Modifizierung der Durchlässigkeit. Auf der Basis der in Abb. 17 dargestellten Potentialenergiekurve haben wir den Einfluß von verschiedenen Massenformeln auf die Spaltwahrscheinlichkeit untersucht. Das benutzte Potential ist zwar unrealistisch, da es eine allzu hohe Spaltbarriere zeigt. Eine eindimensionale Parametrisierung ist offenbar für die Beschreibung des Spaltprozesses unzureichend. Zumindest für die erste Phase der Spaltung braucht man einen anderen Parameter, der das zufrühe Zustandkommen des Halses vermeidet und die Abnahme der Barrierenhöhe verursacht. Trotzdem ist es vorstellbar, daß das vorliegende Modell für eine vorläufige, vergleichende Untersuchung geeignet ist. In Abb. 20 wird der in Ausdruck (2.57) auftretende Integrand repräsentiert, wobei für die Masse folgende Formeln benutzt wurden:

- 1) GCM-Masse
- 2) Cranking-Masse
- 3) Nichtdiagonaler Anteil der Cranking-Masse (der praktisch mit der nichtdiagonalen Näherung der GCM-Masse identisch ist).

Daraus schließt man, daß der Exponent, der die WKB-Durchlässigkeit bestimmt, berechnet mit der Masse 3) sich nicht drastisch von den anderen unterscheidet. Die Begründung dafür liegt in der Tatsache, daß die großen Spitzen in der Masse und in dem Potential benachbart sind, und von diesem Gebiet die wichtigsten Beiträge kommen. Die kleinen Werte der Potentialenergie in der Nähe der Gleichgewichtsdeformation unterdrücken die Information über die Masse in diesem Gebiet.

Die GCM- und Cranking-Durchlässigkeiten unterscheiden sich um einen Faktor 10^8 .

Der Einfluß der ZPE auf Tunnelwahrscheinlichkeiten wurde schon in der Literatur diskutiert [Re75, Re78, RG 80]. Es sei angemerkt, daß die üblichen Potentialenergien überwiegend phänomenologisch sind. Daher ist es nicht konsistent, einfach ZPE-Korrekturen abzuziehen [MG73].

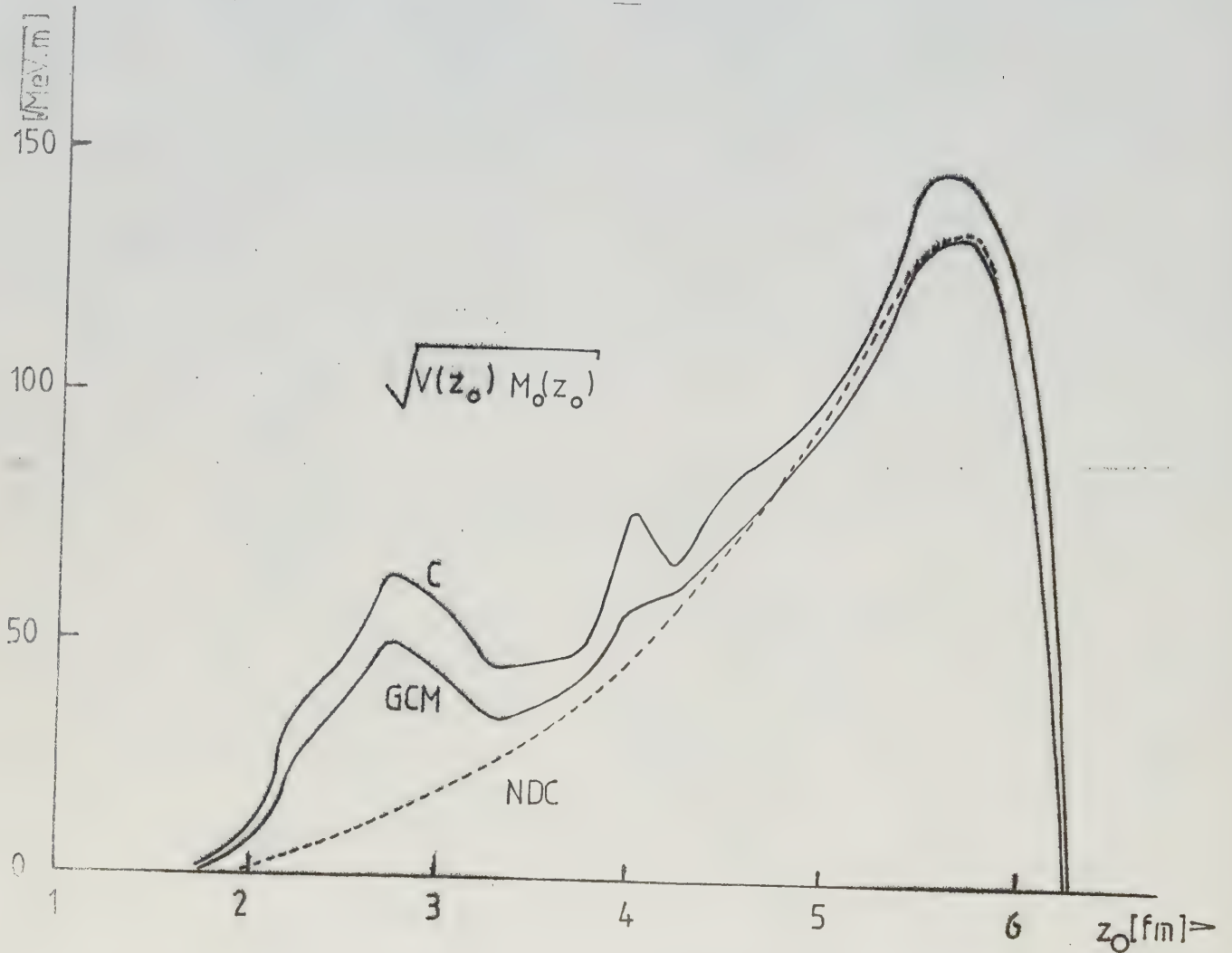


Abb.20

Exponent der WKB-Durchlässigkeit ($E=0$) . Für die Potential-
 energie wurde die Potentialenergiekurve dargestellt in Abb.17
 benutzt. Für die Masse wurden die Cranking-Masse (C, ———),
 die GCM-Masse (GCM, ———) und die "außerdiagonale"
 Cranking-Masse angewandt (NDC, -----).

VII Zusammenfassung und Ausblick

Die Diskussion der kollektiven Bewegung eines wechselwirkenden Vielteilchensystems läßt sich in drei Hauptteile gliedern:

- 1) Definition der physikalisch sinnvollen Freiheitsgrade
- 2) Herleitung eines kollektiven Hamiltonoperators
- 3) quantenmechanische Berechnung des dynamischen Verhaltens des Systems in den kollektiven Koordinaten.

Zugang zu der ersten Aufgabe erhält man entweder aufgrund phänomenologischer Überlegungen (e.g. durch die Spezifizierung eines geeigneten Schalenmodells) oder durch Variationsverfahren wie CHF- bzw. ATDHF-Methode.

In dieser Arbeit haben wir uns auf die zweite Aufgabe konzentriert, insbesondere auf die Frage, eine sinnvolle Darstellung der kollektiven kinetischen Energie des Spaltprozesses zu finden. Die Basis der Diskussion bildete die GCM im Rahmen der GOA. Im einzelnen kamen wir zu folgenden Ergebnissen:

a) Die mit Schalenmodellzuständen und einem Schalenmodell-Hamiltonoperator berechnete GCM-Masse kann die Englische Cranking-Masse nicht überschreiten.

b) Die mit geeigneten CHF-Zuständen und einem Vielteilchen-Hamiltonoperator berechnete GCM-Masse kann in dem statischen Punkt der potentiellen Energie die ATDHF-Masse nicht überschreiten. Eine obere Grenze für die Differenz zwischen den beiden Massen wurde angegeben. Es existiert ein Zusammenhang zwischen dieser Differenz und der Lösung der zweiten ATDHF-Gl.. Ist diese ATDHF-Gl. in Form eines linearen Gleichungssystems gut konditioniert, so ist die Diskrepanz zwischen den ATDHF- und GCM-Massen erwartungsgemäß nicht allzu groß.

c) Bei Schwingungs- und Spaltmoden ist der Beitrag der potentiellen ZPE zur Potentialenergiefläche in dem stationären Punkt besonders wichtig.

Die einzelnen Aspekte der Übertragung dieser Resultate auf Symmetriemoden wurden berücksichtigt. Analytisch lösbare Modelle ermöglichten einen vorläufigen Einblick auf Anwendungen für den Fall von Schwingungen.

In einer numerischen Anwendung unter Benutzung des TCSM als ein Modell für Spaltung wurden die Aussagen a) und c) über die Massen bzw. die ZPE-Korrekturen in Detail überprüft. Ferner wurde die Änderung der Masse bei Berücksichtigung einer einfachen Zweiteilchenwechselwirkung untersucht. Zur weiteren Annäherung an die Realität ist es jedoch notwendig den Hamiltonoperator zu erweitern.

Die numerischen Ergebnisse erlauben die folgenden Aussagen über die GCM-Masse:

Die GCM-Masse ist nur geringfügig kleiner als die Cranking-Masse.

- Die GCM glättet teilweise die starke Schalenfluktuationen, die hauptsächlich den diagonalen Matrixelementen des kollektiven Impulses entstammen.

- Für die letzte Phase des Spaltprozesses wird die GCM-Masse praktisch durch außerdiagonale Beiträge bestimmt. Diese Beiträge geben die gesamte kollektive Masse in der Diskussion nichtadiabatischer Effekte.

- Die Berücksichtigung von Restwechselwirkungen ist bei der Berechnung der GCM-Masse ohne großen Aufwand durchführbar.

Die Lösung der dritten Aufgabe, die wir am Anfang dieses Kapitels erwähnt haben, ist unerlässlich, wenn man einen Kontakt mit Experimenten ermöglichen will. Weder der kollektive Massenparameter noch die ZPE-Beiträge sind direkt experimentell zugänglich. Man benötigt vielmehr die Lösung der kollektiven S-Gl. Da Ankopplung von intrinsischen und kollektiven Freiheitsgraden existieren kann, kann ein Vergleich mit der realen Welt kompliziert werden. In unserer Anwendung benutzten wir ein vereinfachtes, nicht realistisches Modell. Damit wurde kein Anspruch auf einen direkten Vergleich mit experimentellen Ergebnissen hergestellt.

In [KSP76, PKS77, DDR80] wurde gezeigt, daß die Cranking-Masse unter Berücksichtigung der Paarung in dem BCS-Formalismus um einen Faktor 2 zu klein erscheint, um die experimentelle Information über Schwingungsenergieniveaus reproduzieren zu können. Als ein Ergebnis der vorliegenden Arbeit findet man, daß die GCM-Masse in einem Einteilchenbild etwas kleiner als

die Cranking-Masse ist. Demzufolge bleiben nur zwei Möglichkeiten, wenn wir die üblichen Potentialenergieflächen als richtig annehmen : entweder sind die usuellen Approximationen für die Berechnung adiabatischer Massenparameter nicht adäquat (siehe e.g. [PZS75, JM75, DS81]) oder die Annahme der Adiabaticität muß für Schwingungen in Frage gestellt werden.

Im Gegensatz zu dieser Diskrepanz ist die Cranking-Formel imstande, eine allgemeine Beschreibung des systematischen Verhaltens von Spaltlebensdauern zu liefern (e.g. [BPL80]) . Dieses Problem soll weitere Arbeiten auf diesem Gebiet anregen.

VIII. AnhangVIII.1. Mathematische Ergänzung zu Satz 2 (Seite 41)Satz 2

Ist S eine hermitesche, positiv definite Matrix, die μ_1 und μ_N als die kleinsten bzw. die größten Eigenwerte besitzt, so ist dann

$$|(x, y)|^2 \leq (x, Sx)(y, S^{-1}y) \leq \frac{\mu_N}{\mu_1} (x, x)(y, y). \quad (8.1)$$

Beweis der zweiten Ungleichung in (8.1):

Ist S positiv definit, so existiert eine Quadratwurzel $S^{1/2}$, die gleichfalls positiv definit ist. Daher folgt

$$\begin{aligned} (x, Sx) &= (S^{1/2}x, S^{1/2}x) = \|S^{1/2}x\|^2 \leq \|S^{1/2}\|^2 \|x\|^2 \\ &= \mu_N \|x\|^2, \end{aligned} \quad (8.2)$$

wobei die bekannte Ungleichung bezüglich der Norm einer Matrix benutzt wird. Zum anderen verwendet man, daß die Norm einer hermiteschen, positiv definiten Matrix gleich ihrem höchsten Eigenwert ist. Analog dazu gilt

$$(y, S^{-1}y) \leq \frac{1}{\mu_1} \|y\|^2. \quad (8.3)$$

Die Ungleichungen (8.2) und (8.3) lassen sich kombinieren zu

$$(x, Sx)(y, S^{-1}y) \leq \frac{\mu_N}{\mu_1} \|x\|^2 \|y\|^2. \quad \text{q.e.d.} \quad (8.4)$$

Setzt man in (8.1) $x=y$, so erkennt man das Folgende:

i) Die erste Ungleichung in (8.1) entspricht der ersten Ungleichung in (3.26).

ii) Da

$$\frac{\mu_N}{\mu_1} \geq \frac{(\mu_1 + \mu_N)^2}{4\mu_1\mu_N}, \quad (8.5)$$

ist die zweite Ungleichung in (8.1) schwächer als die zweite Ungleichung in (3.26).

Die Größe μ_N/μ_1 , die in (8.1) auftritt, wird Konditionszahl der Matrix S genannt:

$$c(S) = \|S\| \|S^{-1}\| = \frac{\mu_N}{\mu_1}. \quad (8.6)$$

Sie wird bei der Diskussion der Eigenschaften der Lösungen eines linearen Gleichungssystems benutzt.

VIII.2 Darstellung mit Q-Momenten der ersten Iteration der ATDHF-Masse (Seite 42)

Ausgangspunkt der Diskussion in diesem Anhang bildet Gl. (3.40):

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}}) = 2 m_1(p_0) = \sum_n \frac{|\langle n | p_0 | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0}. \quad (8.7)$$

Die kollektive Koordinate q ist der Erwartungswert des Quadrupoloperators Q_0 :

$$q = \langle Q_0 \rangle. \quad (8.8)$$

Die Transformation dieser Koordinate in den Lagrangeschen Multiplikator λ führt zu

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_{\text{st}}) = M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(\lambda=0) \left| \frac{\partial \lambda}{\partial q} \right|^2 \Big|_{\lambda=0}. \quad (8.9)$$

Da die in (8.7) enthaltenen RPA-Zustände Näherungseigenzustände des Operators $H - \lambda Q$ für den minimalen Punkt der potentielle Energie sind

$$\lambda = \frac{d}{dq} \langle H \rangle = 0 \quad (8.10)$$

erhält man:

$$\begin{aligned}
 M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(\lambda=0) &= 2 m_{-1} \left(i \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) = 2 \sum_n \frac{|\langle n | \frac{\partial}{\partial \lambda} | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \\
 &= 2 \sum_n \frac{|\langle n | Q_0 | 0 \rangle|^2}{(E_n - E_0)^3} = 2 m_{-3}(Q_0).
 \end{aligned}
 \tag{8.11}$$

Mit Hilfe des dielektrischen Theorems [BLM79]

$$m_{-1}(Q) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} \langle H \rangle \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle Q \rangle \Big|_{\lambda=0}
 \tag{8.12}$$

erhält man schließlich aus (8.9), und (8.11)

$$M_{\text{ATDHF}}^{(1)}(q_M) = \frac{m_{-3}(Q_0)}{2 (m_{-1}(Q_0))^2}.
 \tag{8.13}$$

VIII.3 Darstellung der GCM-Masse unter alleiniger Berücksichtigung der außerdiagonalen Matrixelementen

Berücksichtigt man lediglich die außerdiagonalen Matrixelemente lautet der Zähler in dem Anregungsbeitrag zu der GCM-Masse

$$\langle \bar{P} H P \rangle = \sum_{j>0}^1 P_{jj}^2 2 E_j
 \tag{8.14}$$

Aus (6.7) und mit Hilfe der Ableitungen nach der kollektiven Koordinate z_0 der BCS-Gleichungen (6.16) und (6.17) schließt man daß

$$P_{jj} = - \frac{\Delta}{2 E_j^2} (K_j - \bar{K}_j)
 \tag{8.15}$$

$$K_j = \epsilon_j' - (\epsilon_j - \lambda) \frac{\Delta'}{\Delta}
 \tag{8.16}$$

$$\bar{K}_j = \sum_j^1 f_j^{(3)} K_j, \quad f_j^{(l)} = \frac{E_j^{-l}}{\sum_k^1 E_k^{-l}}, \quad l = 0, \pm 1, \dots
 \tag{8.17}$$

Setzt man (8.15) in (8.14), so ergibt sich

$$\langle \bar{P}HP \rangle \simeq \sum_j \frac{\Delta^2}{2E_j^3} (k_j - \bar{k}_j)^2 = \frac{1}{2\Delta} n^{(3)} \overline{(k_j - \bar{k}_j)^2}, \quad (8.18)$$

wobei $n^{(3)} = \sum_j \left(\frac{\Delta}{E_j}\right)^3$ die effektive Niveauezahl ist, die zu $\langle \bar{P}HP \rangle$ beiträgt.

Analog dazu kann man auch den folgenden Ausdruck für die Breite $\langle P^2 \rangle$ herleiten

$$\langle P^2 \rangle = \frac{1}{4\Delta^2} n^{(4)} \overline{(k_j - \bar{k}_j)^2}^{(4)} \quad (8.19)$$

Der letzte Index deutet an, daß das über die Klammer durchgeführte Mittel den Gewichtungsfaktor $f^{(4)}$ benutzt, im Gegensatz zu dem Mittel über k , das mit dem Gewichtungsfaktor $f^{(3)}$ gemacht wird. Der Unterschied zwischen beiden Mittelungsverfahren ist jedoch nicht groß und kann vernachlässigt werden.

Die inverse GCM-Masse kann man dann schreiben als

$$M_E^{-1} = \frac{\langle \bar{P}HP \rangle}{2\langle P^2 \rangle^2} \simeq 4\Delta^3 \frac{n^{(3)}}{(n^{(4)})^2} \frac{\overline{(k_j - \bar{k}_j)^2}}{(\overline{(k_j - \bar{k}_j)^2}^{(4)})^2} \quad (6.20)$$

woraus folgt, wenn man die Differenz zwischen den beiden gewichteten Mittel vernachlässigt

$$M_E = \frac{1}{4\Delta^3} \frac{(n^{(4)})^2}{n^{(3)}} \overline{(k_j - \bar{k}_j)^2} \quad (8.21)$$

Liste der verwendeten Abkürzungen

ATDHF, Adiabatic Time-Dependent Hartree-Fock
BCS, Bardeen-Cooper-Schrieffer
CHF, Constrained Hartree-Fock
CRPA, Constrained Random-Phase Approximation
GCM, Generator Coordinate Method
GHW, Griffin-Hill-Wheeler
GOA, Gaussian Overlap Approximation
HF, Hartree-Fock
HFB, Hartree-Fock-Bogoliubov
JWKB, Jordan-Wenzel-Kramers-Brillouin
PIM, Path integral Method
RPA, Random-Phase Approximation
S, Schrödinger
TCSM, Two-Center Shell Model
TDGCM, Time-dependent Generator Coordinate Method
TDHF, Time-dependent Hartree-Fock
WKB, Wenzels-Kramers-Brillouin
ZPE, Zero-Point Energy

X. Literaturverzeichnis

- ABC77a A.Alves et al, Prog.Theor.Phys.58(1977)223
- ABC77b A.Alves et al, Nucl.Phys.A284(1977)420
- ALM66 D.Agassi,H.J.Lipkin,N.Meshkov,Nucl.Phys.86(1966)321
- AW82 H.J.Assenbaum,A.Weiguny,in Lect.Notes in Physics
161, Springer, Berlin, 1982, 192
- Ba80 W.Bauhoff, Ann.Phys.130(1980)307
- BB71 R.Bellman,E.F.Beckenbach, Inequalities, Springer,
Berlin, 1971
- BB73 B.Banerjee,D.M.Brink,Z.Phys.258(1973)46
- BC80 J.F.Berger,D.Cogny,Nucl.Phys.A333(1980)302
- BD79 J.Broeckhove,E.Deumens,Z.Phys.A292(1979)243
- BDJ72 M.Brack,J.Damgaard,A.S.Jensen,H.C.Pauli,V.M.
Strutinsky,C.Y.Wong,Rev.Mod.Phys.44(1972)320
- BL75 M.Bouten,P.Van Leuven (Eds.),Proc.2nd Int. Sem. on
the GCM,Mol,1975
- BLM79 O.Bohigas,A.M.Lane,J.Martorell,Phys.Rep.51(1979)267
- BM69 A.Bohr,B.R.Mottelson,Nuclear Structure,vol I,
Benjamin, New York, 1969
- BM75 A.Bohr,B.R.Mottelson,Nuclear Structure,vol II,
Benjamin, New York, 1975
- BMP81 R.Beck,M.V.Mihailovic,M.Poljsak,Nucl.Phys.A351(1981)
295
- BP82 D.Baye,N.Pecher,Nucl.Phys.A379(1982)330
- BPL80 A.Baran,K.Pomorski,S.E.Larssen,P.Möller,S.G.Nilsson
J.Randrup,A.Lukasiak,A.Sobiczewski,in Phys. Chem.
of Fission 1979,IAEA,Vienna,1980,vol I,143
- Br80 M.Brack, in Phys. Chem.of Fission 1979, IAEA,Vienna
1980,vol I,227
- Br81 J.Broeckhove,J.Phys.G7(1981)L259
- BS79 D.Baye,Y.Salmon,Nucl.Phys.A323(1979) 521,A331(1979)
254

- BV78 M.Baranger,M.Veneroni,Ann.Phys.114(1978)123
- BW68 D.M.Brink,A.Weiguny,Nucl.Phys.A120(1968)59
- BW80 W.Bauhoff,K.Wildermuth,J.Phys.G6(1980)1211
- CD79 M.H.Caldeira,J.M.Domingos,Prog.Theor.Phys.61(1979)1342
- CDT78 P.Chattopadhyay,R.M.Dreizler,M.Trsic,M.Fink,Z.Phys.
A285(1978)7
- CP81 P. Chattopadhyay,J.da Providência,Nucl.Phys.A370
(1981)445
- DDR80 J.Dudek,W.Dudek,E.Ruchowski,J.Salewski,Z.Phys.A294
(1980)341
- DGT80 M.Desgrolard,W.Glöckle,J.le Tourneux,Nucl.Phys.A339
(1980)1
- Do81 J.Dobaczewski,Nucl.Phys.A369(1981)213,239
- DS81 J. Dobaczewski,J.Skalski,Nucl.Phys.A369(1981)123
- Fa82 J.E.G.Farina,Int.J.Theor.Phys.21(1982)83
- FC72 L.S.Ferreira,M.H.Caldeira,Nucl.Phys.A189(1972)250
- FH79 M.Fellah,T.F.Hamann,Phys.Rev.C20(1979)1560
- FH80 Y.Fujiwara,H.Horiuchi,Prog.Theor.Phys.63(1980)895
- FH81 Y.Fujiwara,H.Horiuchi,Prog.Theor.Phys.65(1981)1632,
1901
- FHV80 H.Flocard,P.H.Heenen,D.Vautherin,Nucl.Phys.A339(1980)
336
- FPU79 C.Fiolhais,J.Pinheiro da Providência,J.N.Urbano,
Physica 99A(1979)251
- Fr81 H.Friedrichs,Phys.Rep.74(1981)209
- FT81 H.R.Fiebig,W.Timm,Nucl.Phys.A368(1981)164
- FW70 W.A.Friedman,L.Wilets,Phys.Rev.C2(1970)892
- GG79 M.Girod,B.Grámaticos,Nucl.Phys.A330(1979)40
- GH57 J.J.Griffin,J.A.Wheeler,Phys.Rev.108(1957)311
- GH81 B.G.Giraud,J.Hahn,Phys.Rev.23C(1981)1486,1495
- GK80 J.N.Ginocchio,M.W.Kirson,Nucl.Phys.A350(1980)31
- GLM78 K.Goeke,A.M.Lane,J.Martorell,Nucl.Phys.A296(1978)109

- GMQ76 M.J.Giannoni,F.Moreau,P.Quentin,D.Vautherin,M.
Veneroni,D.M.Brink,Phys.Lett.65B(1976)305
- GQ80 M.J.Giannoni,P.Quentin,Phys.Rev.C21(1980)2060,2076
- Gr57 J.Griffin,Phys.Rev.108(1957)328
- GR59 W.Greub,W.Rheinboldt,Proc.Amer.Math.Soc.10(1959)
407
- GR78 K.Goeke,P.G.Reinhard,Ann.Phys.112(1978)328
- GR80 K.Goeke,P.G.Reinhard,Ann.Phys.124(1980)249
- GRR82 K.Goeke,P.G.Reinhard,H.Reinhardt,Nucl.Phys.A378(1982)
470
- GT78 D.Galetti,A.F.R.de Toledo Piza,Phys.Rev.C17(1978)
774
- GT81 D.Galetti,A.F.R.de Toledo Piza,Phys.Rev.C24(1981)
2311
- HMG69 P.Holzer,U.Mosel,W.Greiner,Nucl.Phys.A138 (1969)
241
- Ho73 G.Holzwarth,Nucl.Phys.A207(1973)545
- Ho81 G.Holzwarth,Comm.Int.Nucl.Phys.Workshop,Trieste,
1981
- HW53 D.L.Hill,J.A.Wheeler,Phys.Rev.189(1953)1102
- HW73 P.K.Haff,L.Wilets,Phys.Rev.C7(1973)951
- HW74 P.K.Haff,L.Wilets,Phys.Rev.C10(1974)353
- HY74 G.Holzwarth,T.Yukawa,Nucl.Phys.A219(1974)125
- Ir54 D.R.Inglis,Phys.Rev.96(1954)1059
- In55 D.R.Inglis,Phys.Rev.97 (1955) 701
- In 56 D.R.Inglis,Phys.Rev.103(1956)1786
- JM75 A.S.Jensen,A.Miranda,Nucl.Phys.A244(1975)93
- JS64 B.Jancovici ,D.H.Schiff,Nucl.Phys.58(1964)678
- KL64 I.Kelson,C.A.Levinson,Phys.Rev.134(1964)B269
- KM82 R.Krivec,M.V.Mihailovic,J.Phys.G8(1982)821
- KSP76 T.Kaniowska,A.Sobiczewski,K.Pomorski,Nucl.Phys.
A274(1976)151
- La76 L.Lathouwers,Ann.Phys.102(1976)347

- La81 K.Langanke, Phys.Lett.104B (1981)112,429
- LBH80 M.Libert-Heineman,D.Baye,P.H.Heenen,Nucl.Phys.A339
(1980)429
- LDM72 P.Lichtner,D.Drechsel,J.Maruhn,W.Greiner,Phys.Rev.
Lett.28(1972)829
- LM80 A.M.Lane,J.Martorell,Ann.Phys.129(1980)273
- LMG65 H.J.Lipkin,N.Meshkov,A.J.Glick,Nucl.Phys.62 (1965)
188,199,211
- LP73 T.Lederberger,H.C.Pauli,Nucl.Phys.A207(1973)1
- Me70 E.Melzbacher,Quantum Mechanics,Wiley,New York,1970,
2nd ed.
- MG73 J.Maruhn,W.Greiner,Phys.Lett.44B(1973)9
- MGS80 J.Maruhn,W.Greiner,W.Scheid, in Heavy ion reactions
Ed.R.Block,North-Holland,Amsterdam,1980,vol II
- MN78 P.Möller,J.R.Nix,Nucl.Phys.A296(1978)289
- MP82 A.K.Mukharjee,M.K.Pal,Nucl.Phys.A373(1982)289
- MR73 M.V.Mihailovic,M.Rosina(Eds), GCM for Nucl. Bound
States and Reactions,Fizika 5(1973) Suppl.
- Ni72 J.R.Nix,Ann.Rev.Nucl.Sci.22(1972) 65
- OU75 N.Onishi,T.Une,Prog.Theor.Phys.53(1975)504
- Pe77 A.M.Perelomov,Sov.Phys.Usp.20(1977)703
- Pe79 R.Peierls, Surprises in Theoretical Physics,PUP,
Princeton,1979
- PKS77 K.Pomorski,T.Kaniowska,A.Sobiczewski,S.Rohozinski,
Nucl.Phys.A283(1977)394
- Pr70 J.da Providência,Nucl.Phys.A157(1970)358
- PS81 E.J.V.de Passos,F.F.de Sousa Cruz,Phys.Rev.24C(1981)
690
- PT62 R.E.Peierls,D.J.Thouless,Nucl.Phys.38(1962)154
- PT80 E.J.V. de Passos,A.F.R. de Toledo Piza,Phys.Rev.C21
(1980) 425
- PUF71 J.da Providência,J.N.Urbano,L.S.Ferreira,Nucl.Phys.
A170(1971)129

- PY57 R.Peierls,Y.Yoccoz,Proc.Phys.Soc.(London)A70(1957)
381
- PZS75 M.K.Pal,D.Zawischa,J,Speth,Z.Phys.A272(1975)387
- Re74 P.G.Reinhard,Z.Phys.266(1974)377
- Re75 P.G.Reinhard,Nucl.Phys.A252(1975)120,133
- Re76 P.G.Reinhard,Nucl.Phys.A261(1976)291
- Re78 P.G.Reinhard,Nucl.Phys.A306(1978)19
- Re80 H.Reinhardt,Nucl.Phys.A346(1980)1
- Re81 H.Reinhardt,Nucl.Phys.A367(1981)269,A369(1981)109
- Re82 H.Reinhardt,Fort.Physik 30 (1982) 127
- RG78 P.G.Reinhard,K.Goeke,J.Phys.G4(1978)L245
- RG79 P.G.Reinhard,K.Goeke,Phys.Rev.C20(1979)1546
- RG80 P.G.Reinhard,K.Goeke,in Phys.Chem.Fission 1979,
IAEA,Vienna,1980,vol.II,399
- RMG80 P.G.Reinhard,J.Maruhn,K.Goeke,Phys.Rev.Lett.44(1980)
1740
- Ro70 D.J.Rowe,Nuclear Collective Motion,Methuen,London,
1970
- RR80 D.J.Rowe,A.G.Ryman,Phys.Rev.Lett.45(1980)406
- RRB74 P.G.Reinhard,N.Rowley,D.M.Brink,Z.Phys.266(1974)149
- RS80 P.Ring,P.Schuck,The Nuclear many-body problem,
Springer,New York,1980
- Ru81 M.C.Ruivo,Prog.Theor.Phys.66(1981)2161
- RY66 H.Rouhaninejad,J.Yoccoz,Nucl.Phys.78(1966)353
- Sc81 G.Schütte,Phys.Rep.80(1981)113
- Sc82 O.Schöllner,Dissertation,Frankfurt,1982
- SGM71 D.Scharnweber,W.Greiner,U.Mosel,Nucl.Phys.A164(1971)
257
- So79 A.Sobiczewski,Sov.J.Part.Nucl.10(1979)466
- SPT80 Sup.Prog.Theor.Phys.68(1980)
- St77 V.M.Strutinsky,Z.Phys.A280(1977)99
- Th61 D.J.Thouless,Nucl.Phys.22(1961)78

- TP78 A.F.R.de Toledo Piza,E.J.V.de Passos,Nuovo Cim.45B
(1978)1
- TPG77 A.F.R.de Toledo Piza,E.J.V.de Passos,D.Galetti,M.
C.Nemes,M.M.Watanabe,Phys.Rev.C15(1977)1477
- TV62 D.J.Thouless,J.G.Valatin,Nucl.Phys.31 (1962)211
- UGR81 J.N.Urbano,K.Goeke,P.G.Reinhard,Nucl.Phys.A370(1981)
329
- Vi75 F.Villars,in Proc.Int,Conf.Nucl.Self-Consistent
Fields,Trieste,1975,ed.G.Ripka,M.Porneuf,North-Hol-
land,Amsterdam,1975,3
- Vi77 F.Villars,Nucl.Phys.A285(1977)269
- Wi64 L. Wilets,Theories of Nuclear Fission, Clarendon
Press,Oxford,1964
- WK79 K.Wildermuth,E.J.Kanellopoulos,Rep.Prog.Phys42(1979)
1719
- Wo75 C.W.Wong,Phys.Rep. 15 (1975) 283
- WTH75 L.Wilets,D.R.Tuerpe,P.K.Haff,Phys.Rev.C12(1975)
2088
- WTT68 S.K.M.Wong,M.K.Tienhaara,L.E.H.Trainor,Phys.Rev.
Lett.21(1968) 1819
- Yo57 J.Yoccoz,Proc.Phys.Soc.(London)A70(1957)388

Mein sehr verehrter Mentor, Herr Prof. Dr. R.M.Dreizler, hat diese Arbeit angeregt. Ihm, der mich während ihrer Entstehung mit seinem äußerst geschätzten Rat und viel Verständnis unterstützt hat, gilt mein tiefempfunderer Dank.

Ferner bin ich dem Departamento de Física, Universidade de Coimbra, sehr verbunden, das mir die Voraussetzungen zur Promotion in Frankfurt geboten hat.

Die Gulbenkian-Stiftung in Lissabon hat meinen Aufenthalt in Frankfurt an der Johann Wolfgang Goethe-Universität durch ein Stipendium freundlicherweise ermöglicht.

Ich bedanke mich an dieser Stelle auch bei Herrn Prof. Dr. J. da Providência für seine hilfreiche Unterstützung und Herrn Dipl. Math. J. Queiró für seine Hinweise über quadratische Formen.

Meinen Kollegen Dr. H.J. Lüdde, Dipl.Phys. A.Henne, Dipl. Phys. W. Stich und H. Kohl danke ich für ihre wertvolle Hilfe bei der sprachlichen Abrundung der Arbeit. Weiterhin bin ich Frau B. Barth zu Dank verpflichtet, die geduldig die abschließende Revision durchgeführt hat.

Die numerische Rechnungen wurden an der UNIVAC 1108 des Hochschulrechenzentrums der Universität Frankfurt durchgeführt.

Lebenslauf

Carlos Manuel Baptiste Fiolhais

Geburt : 12.Juni 1956 in Lissabon, Portugal

Ausbildung: Von 1961/62 bis 1965/66 Grundschule in Lissabon und Coimbra.

Von 1966/67 bis 1972/73 Gymnasium in Coimbra ("Liceu Nacional D. João III").

Von 1973/74 bis 1977/78, Hochschulstudium(Physik) an der Universität Coimbra.

Anschließend 1978/79 Besuch eines postgraduierten Kurses in theoretischer Physik in Coimbra.

Beginn der Doktorarbeit im Wintersemester 1979/80 an der Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main.

Studienabschlüsse : "Bacharelato" (Vordiplom), 1976
"Licenciatura" (Diplom), 1978

Beruf : Seit 1977 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität Coimbra.

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren:

In Coimbra:

M.Almeida, C.Alves, R.Coelho, C.Conde, M.Costa, J.Domingos, M.S.Leite, P.Martins, A.Melo, A.Policarpo, J.da Providência, C.Sá Furtado, J. Sampaio Martins, F.Sanches, J.Urbano.

In Frankfurt:

R.Dreizler, H.Miller, B.Müller, U.E.Schröder

